



University
of Glasgow

<https://theses.gla.ac.uk/>

Theses Digitisation:

<https://www.gla.ac.uk/myglasgow/research/enlighten/theses/digitisation/>

This is a digitised version of the original print thesis.

Copyright and moral rights for this work are retained by the author

A copy can be downloaded for personal non-commercial research or study,
without prior permission or charge

This work cannot be reproduced or quoted extensively from without first
obtaining permission in writing from the author

The content must not be changed in any way or sold commercially in any
format or medium without the formal permission of the author

When referring to this work, full bibliographic details including the author,
title, awarding institution and date of the thesis must be given

Enlighten: Theses

<https://theses.gla.ac.uk/>
research-enlighten@glasgow.ac.uk

MODERN TECHNIQUES IN DIRECT METHODS

APPENDIX IV

Submitted to the University of Glasgow for the
Degree of Doctor of Philosophy in the Faculty
of Science.

by

Andrew A. Freer

Chemistry Department

May 1980

ProQuest Number: 10984314

All rights reserved

INFORMATION TO ALL USERS

The quality of this reproduction is dependent upon the quality of the copy submitted.

In the unlikely event that the author did not send a complete manuscript and there are missing pages, these will be noted. Also, if material had to be removed, a note will indicate the deletion.



ProQuest 10984314

Published by ProQuest LLC (2018). Copyright of the Dissertation is held by the Author.

All rights reserved.

This work is protected against unauthorized copying under Title 17, United States Code
Microform Edition © ProQuest LLC.

ProQuest LLC.
789 East Eisenhower Parkway
P.O. Box 1346
Ann Arbor, MI 48106 – 1346

APPENDIX IV

Tables of observed and calculated structure factors.

(IIIa)

Crystal data

Angular dimer of 2-phenylbenzazete, $C_{26}H_{18}N_2$, $M_r=358.6$,
triclinic, $a=6.711(1)$, $b=12.456(2)$, $c=11.796(2)$ Å, $\alpha=87.0(1)$,
 $\beta=78.2(1)$, $\gamma=74.4(1)^\circ$, $U=929.8$ Å³, $D_c=1.27$, $D_x=1.28$ Mg m⁻³,
 $Z=2$, $F(000)=376$, space group $P\bar{1}$, $\mu(Mo-K_\alpha)=0.82$ cm⁻¹.

[illegible]

0,13,L	1,-14,L	-3	68	-72	-4	192	-197	-7	36	37	11	71	-72	-5	164	-153
-3	63	64	56	56	-3	44	-39	-5	125	125				-4	200	-198
-1	35	39	-1	79	-2	114	114	-4	94	-86	1,-4,L			-3	82	-79
1	97	-99	0	64	-1	44	38	-3	52	49				-2	268	-251
3	125	129	0	42	0	123	116	-2	137	-138	-12	48	47	-1	596	-593
5	41	-40	3	63	65	1	78	-1	113	-108	-11	75	77	0	88	-86
9	41	36	4	97	-101	3	-158	0	135	-122	-10	46	44	1	217	210
0,14,L	1,-12,L		6	111	113	4	41	1	339	319	-9	56	-60	2	61	-55
-4	52	54	8	45	-48	5	-69	2	93	84	-8	124	-121	3	54	50
-1	61	-53	9	45	-50	6	80	4	97	-96	-6	107	101	4	98	-83
2	49	53				11	77	6	108	-108	-4	284	279	6	133	122
4	79	-78	1,-9,L				-75	7	99	99	-3	205	-191	7	174	-173
7	46	-46						9	105	104	-2	58	-59	8	299	-303
0,15,L											-1	398	-387	10	126	126
-7	48	-47	-8	48	46	-10	36	-37	1,-5,L		0	189	-175			
0	38	45	-7	61	-61	-8	58	-56			1	308	295	1,-2,L		
2	45	-55	-5	104	105	-7	45	-48	-10	41	2	148	-137			
3	44	-45	-4	108	-110	-6	99	96	-9	82	3	44	-48	-14	48	-49
0,16,L			-3	114	-112	-5	52	54	-8	56	4	53	-46	-10	116	112
5	70	67	-1	83	83	-4	116	-118	-7	84	5	35	35	-9	138	-143
1,-15,L			0	55	53	-3	47	-45	-5	111	6	125	121	-8	76	79
			2	50	53	-2	78	77	-4	49	7	51	58	-7	33	32
			4	61	-61	0	53	-54	-3	156	8	79	81	-6	59	60
			6	110	113	1	174	-166	-2	151	9	283	-289	-4	201	-192
			7	46	47	2	124	-119	-1	63	10	171	-175	-3	293	-289
			8	71	-73	3	79	72	0	83	11	68	73	-2	223	-221
			10	50	46	5	59	-60	1	207	13	61	61	-1	840	862
			11	53	53	7	78	-80	3	40				0	1098	1198
						8	71	-69	4	30	1,-3,L			1	603	-516
			1,-8,L						5	84				2	554	555
									6	53				3	426	-415
			-13	36	30	1,-6,L			7	37	-13	45	-45	4	142	-131
			-7	69	-74				8	118	-10	50	-50			
			-6	152	155	-12	53	-52	9	197	-9	46	-47			
			-5	41	47	-10	60	-65			-7	46	44			

[illegible]

1,10,L	-6	35	36	7	49	-47	-5	75	-75	2,-7,L	7	178	180	-2	40	34
-7	152	-162	-5	89	92		-3	72	81		8	47	-49	-1	245	228
-4	88	88	-1	139	-142	2,-14,L	-1	50	50		9	188	-192	0	59	-60
-3	57	-56	1	191	197		0	77	79	-7	10	36	31	1	50	47
-2	115	-117	2	62	65	-2	2	66	-65	-6	13	67	77	2	185	174
-1	68	63	4	159	-158	-1	4	78	79	-5	13	67	77	3	349	-336
2	128	128	10	42	38	2	5	36	-36	-4	2	5,5,L		4	188	184
3	96	-100	1,13,L			2,-13,L	6	72	70	-2				5	116	-116
4	50	-48								-1				6	98	-99
5	167	-172					2,-9,L			0	-10	40	-40	7	63	70
6	114	118	-10	68	65	1	35			2	-7	39	-34	8	86	84
9	96	97	-8	75	-74	3	32			4	-6	36	41	9	52	57
10	69	-72	-4	36	-43	2,-12,L	-10	80	-40	5	-5	46	49	10	42	-41
11	98	-102	-1	42	41		0	55	57	6	-4	139	-139	12	36	37
1,11,L			0	58	54		3	55	-58	7	-3	194	-188	13	50	-45
-6	51	58	1	153	-151	-6	5	55	-57	8	-2	143	-136	14	67	65
-4	48	51	2	60	-63	-5	8	60	-57	9	-1	149	-134			
-2	37	36	3	38	37	-3	9	58	-55		3	43	47	2,-3,L		
-1	84	81	4	42	-34	-1				2,-6,L	4	66	-64			
0	134	-134	7	38	-40	0	2,-8,L				5	62	52			
1	76	-77				1	64			-12	7	282	-287	-13	38	35
2	200	203				0	32			-9	8	149	-153	-8	33	30
3	99	97				1	64			-8	9	127	127	-7	55	-61
4	36	-36				5	65			-7	10	59	59	-5	116	-106
6	68	64				2,-11,L	-5	68	-64	-6	11	54	-59	-3	677	666
10	47	-47					-4	101	-98	-5				-2	485	463
11	54	50				-9	-2	87	-81	-4	2,-4,L			-1	350	-333
1,12,L						-7	-1	147	142	-3				0	206	-191
-3	58	53				-4	1	163	-171	-2	-14	42	-37	1	132	125
3	75	75				0	4	153	-159	-1	-11	53	54	2	78	79
4	47	49				2	5	113	123	0	-9	39	-36	3	97	88
-8	72	-79				2,-10,L	7	65	-59	1	-7	187	-187	4	218	217
							8			3	-5	69	68	5	51	54
										5	-4	247	-236	6	74	67
										6	-3	202	-201	9	33	39

[illegible]

2,9,L	1	259	-265	2,15,L	-2	86	-83	-7	55	59	4	49	50	-5	64	60
-3	4	61	-63	-7	-1	42	-50	-4	72	-70	5	106	-109	-4	142	-136
-2	12	56	-56	-3	0	58	63	-3	66	-67	6	101	98	-3	50	50
0	13	72	-75	7	2	40	-36	0	52	54	8	32	-38	-2	166	163
1	2,12,L			50	4	93	-97	4	45	41	10	36	34	-1	148	-134
4	115	112		2,17,L	6	43	-46	6	111	-115	14	37	40	0	103	-87
7	36	34	-74	-3	10	42	-40	7	100	-101	3,-4,L			2	83	-80
9	139	-142	-56	37	3,-9,L			13	56	-53				4	164	-158
11	127	132	37	3,-14,L	-1	45	40	-11	60	57	-9	57	60	5	32	-29
2,10,L	-3	39	35	-1	0	38	38	-8	36	-34	-8	42	-39	9	59	65
-1	73	-78	-78	65	2	92	-95	-7	95	-104	-7	49	-48	14	34	-27
-7	71	-168	-168	0	3	64	-65	-4	143	-143	-6	71	-74	3,-2,L		
-6	60	49	49	0	6	41	41	-1	34	28	-5	428	434			
-5	104	-40	-40	3	7	49	51	0	74	-72	-4	98	101	-13	58	56
-3	64	-39	-39	57	3,-12,L			1	40	39	-3	210	-210	-9	63	-63
-2	184	-47	-47	3,-11,L	3,-8,L			2	74	-75	1	168	160	-8	52	47
-1	73	-77	-77	62	59	61	-62	3	48	56	3	251	244	-7	202	-203
0	316	320		-1	55	83	90	5	372	-376	4	206	-199	-6	112	114
1	148	148	97	0	-35	65	61	7	193	196	5	29	26	-4	38	38
2	59	-55	-55	3	54	105	-107	10	48	-50	6	112	-113	-2	35	-32
3	42	107	107	4	37	0	100	3	5,L		7	67	74	-1	116	-114
4	100	156	156	8	59	2	50	3,-5,L			10	69	74	0	201	-183
5	52	-30	-30	3,-11,L		55	50	7	91	-94	11	51	-55	1	50	50
6	55	56	56	5	39	177	176	-7	36	-41	13	96	91	2	81	72
7	49			-5	53	7	53	-6	143	142	14	49	-54	3	450	-437
10	72			-4		8	-46	-4	203	198	3,-3,L			4	227	229
2,11,L	-2	42	45	3,-10,L	12	53	62	-3	72	-71				5	55	39
-6	81	-79	80	-6	58	-58		-1	41	-39	-13	50	-62	6	132	122
-3	34	-41	-67	-5	46	48		1	42	44	-9	71	72	8	52	-51
-1	214	213	37					2	172	174	-6	30	-32	14	71	72

[illegible]

3,12,L	3,16,L	4,-8,L	4	58	-57	-8	55	58	-7	114	-113	-8	37	43
0 141 145	-1 46 49	-6 61 -62	6	79	-83	-7	70	-73	-6	84	-84	-3	33	39
1 36 32	0 53 -49	-5 48 -50	7	89	100	-4	49	49	-5	73	78	-2	62	65
2 55 61	1 60 -62	-3 49 49	12	51	59	-3	49	-42	-4	50	-55	-1	83	85
5 34 -32		2 32 -33	4,-5,L			-2	36	-37	-2	123	113	0	188	-178
7 50 47	4,-13,L	3 49 48				-1	38	42	-1	73	-76	1	157	-152
8 54 59		4 117 -119	-7	62	59	0	49	-45	0	36	37	3	41	41
		5 118 -121	-4	57	-59	1	141	-137	2	32	-34	4	145	-143
3,13,L	-1 59 -57	6 74 76	-3	124	125	3	244	241	3	55	57	5	36	-33
	1 67 64	7 42 37	-2	44	43	4	110	107	4	65	64	9	34	-40
	4,-12,L	10 66 -63	0	47	50	5	152	-155	6	29	-27	10	87	-94
-4 54 55			1	37	-38	6	31	29						
1 62 -64	6 62 -57	4,-7,L							10	96	108	4,2,L		
5 35 31			2	42	-43				11	65	68			
7 56 -58			5	60	-60	4,-2,L								
9 40 -33	4,-11,L	-6 70 -74	6	72	-73	-9	66	65				-6	55	58
		-4 96 98	7	87	82	-8	46	52	4,0,L			-3	35	-31
3,14,L	1 34 -39	-2 60 -58	13	69	-65				-12	51	-42	-2	63	63
	2 65 -66	-1 48 -54								42	38	-1	272	-272
-3 38 -36	4 35 22	1 49 48	4,-4,L			-5	150	149	-5	46	-45	0	164	-159
-2 46 -50		5 59 58				-4	61	-62	-4	66	-65	2	198	186
-1 41 50	4,-10,L	6 40 37	-10	34	-40	-2	119	117	-3	143	139	3	33	-38
2 39 -38		7 80 -79	-7	124	-128	-1	91	-87	-2	63	64	5	151	-150
3 65 64	-4 66 68		-6	61	58	1	43	39	-1	107	103	14	45	44
6 43 -41	4 55 52	4,-6,L	-4	130	130	2	58	53	0	95	-89	4,3,L		
	7 40 -37		-3	63	-64	4	65	-56	1	116	108			
3,15,L		-6 61 64	-2	66	-67	5	112	105	2	63	-64	-10	43	44
	4,-9,L	-5 167 171	-1	58	-60	6	53	-59	8	35	-45	-6	59	58
-5 42 -37		-4 80 -79	2	130	-129	11	60	-65	9	154	163	-3	78	-77
-3 48 46	-8 65 69	-1 53 -61	4	195	193				10	34	38	-2	56	-54
-1 53 50	4 115 113	0 120 123	5	225	-236	4,-1,L			12	65	-76	-1	129	128
1 82 -84	6 97 -101	1 77 76	6	104	104							0	236	232
3 48 58		2 57 52				-11	45	-48	4,1,L			2	59	54
		3 60 68	4,-3,L			-9	97	97				3	54	50

[illegible]

[illegible]

[illegible]

[illegible]

(IIIB)

Crystal data

Angular dimer of 2-(p-methoxyphenyl) benzazete, $C_{28}H_{22}O_2N_2$,
 $M_r=418.5$, monoclinic, $a=8.526(1)$, $b=23.003(3)$, $c=12.415(1)$ Å,
 $\beta=112.5(1)^\circ$, $U=2250.2$ Å³, $D_c=1.24$, $D_m=1.24$ Mg m⁻³, $Z=4$,
 $F(000)=880$, space group $P2_1/c$, $\mu(Mo-K\alpha)=0.85$ cm⁻¹

10,11,L	10,0,L	9,7,L	-12	75	-73
-7 112 110	-10 50 50	2 69 72	9,1,L		
		-2 37 -41			
10,10,L	9,15,L	-6 107 -105	3 93 -98		
		-11 39 -32	2 40 -38		
-6 106 -105	-3 100 95		0 103 106		
-8 67 64	-8 62 -65	9,6,L	-7 75 -79		
			-9 54 -54		
10,9,L	9,14,L	1 40 -41	-11 36 35		
		-1 63 66	-12 66 -66		
-2 91 99	-1 74 75	-5 79 -83			
-4 136 -142		-9 47 -46	9,0,L		
-8 45 42	9,13,L	-12 50 45			
			2 82 89		
10,8,L	-8 79 -77	9,5,L	0 126 -127		
			-6 132 -136		
-3 44 47	9,12,L	2 71 -74	-8 77 81		
-7 82 80		0 67 73	-10 102 -112		
-9 103 -99	-4 88 -95	-3 88 90			
	-5 91 -98	-9 49 -43	8,19,L		
10,7,L		-10 56 -49			
	9,11,L	-11 136 132	-3 106 104		
-10 115 111			-5 114 -118		
	1 37 -36	9,4,L			
10,6,L	-7 98 -110		8,18,L		
	-8 157 163	2 59 -61			
-5 78 86	-10 99 -94	0 149 154	-2 98 -91		
	-11 86 90	-1 93 -102	-4 69 67		
10,5,L		-3 73 82	-5 45 -51		
	9,10,L	-7 74 79			
-9 75 -80		-8 59 55	8,17,L		
	1 49 -51	-9 26 30			
10,4,L	-11 55 51	-13 54 -60	-2 100 98		
			-9 72 66		
-2 72 77	9,9,L	9,3,L			
			8,16,L		
10,3,L	-3 29 35	2 58 59			
	-5 81 88	1 45 43	1 105 105		
-1 36 38	-6 110 119	-1 46 -51	0 65 60		
	-7 79 -74	-7 86 -86	-1 104 -99		
10,2,L	-8 139 -135	-9 62 59	-2 71 72		
	-10 113 113	-12 88 -79			
-1 28 36	-11 35 37	-13 71 -71	8,15,L		
10,1,L	9,8,L	9,2,L	2 81 -84		
			-3 58 -62		
0 98 -108	-8 148 150	-1 64 -68	-4 69 -68		
-1 53 -53	-10 75 -82	-4 124 -134	-9 67 63		
-4 95 103	-12 92 -90	-6 26 31			
-6 82 -85		-7 87 -65			
-8 64 72		-9 61 70			

8,14,L	3	57	-58	8,4,L	0	67	-70				
	2	33	40		-1	106	110				
-2	86	89	1	67	72	-2	106	109			
-4	64	-64	-1	43	-40	-3	148	155			
-5	70	72		32	-33	-5	144	-150			
-6	57	-60	8,8,L	2	76	-78	-6	138	-145		
-9	76	81		1	98	-98	-7	95	95		
	2	40	38	-2	92	83	-8	79	87		
8,13,L	1	44	54	-3	101	100	-9	77	81		
	0	59	65	-9	58	-67	-10	73	-73		
-2	64	65	-4	145	-145	-10	88	-98	-12	132	128
-3	59	-57	-5	60	60				-13	71	-70
-5	149	156	-6	74	68	8,3,L			8,0,L		
-6	54	-53	-7	58	-60	5	82	-85			
-7	39	-43	-8	154	-156	4	51	-60	4	177	180
-9	30	29	-10	28	33	2	81	81	2	307	-306
			-12	90	91	1	175	177	0	261	256
8,12,L			8,7,L			0	97	99	-2	162	-162
1	37	-41				-1	131	-131	-4	49	-55
-5	86	85	3	67	69	-2	94	-92	-6	304	318
-6	133	139	1	73	-74	-6	65	-69	-8	85	-83
-8	44	-41	-1	45	45	-7	146	-158	-10	117	119
-9	40	-46	-2	117	-120	-9	57	58	-14	36	-39
-10	61	-58	-7	72	-69	-13	62	60			
-12	71	64	-8	58	57	-14	48	55	7,22,L		
			-9	82	80						
8,11,L			-11	26	22	8,2,L			-6	38	-34
			-13	63	-65	5	74	-72	7,21,L		
1	31	-35				4	34	40			
-3	170	176	8,6,L			3	77	-78	0	57	58
-5	64	67				2	90	93	-3	51	-42
-6	60	-55	2	84	-86	1	206	-205	-6	41	-43
-7	71	79	1	49	-51	0	181	-177	-7	43	43
-8	72	-76	-2	93	92	-1	224	219			
-11	49	-56	-5	27	-24	-2	60	-57	7,20,L		
			-9	70	70	-4	93	102			
8,10,L			-10	47	-47	-5	69	70	-1	58	-51
			-11	46	-46	-7	96	102	-2	61	-57
4	35	32	-12	28	-27	-9	114	-121	-4	86	85
0	122	-123	-13	45	-48	-10	69	-63	-6	29	-28
-1	89	89	8,5,L			-11	52	51	-8	60	66
-2	70	72				-12	87	84	-9	41	-33
-4	55	54	4	32	41	-13	99	101			
-5	61	-59	2	65	63	-14	79	84	7,19,L		
-6	169	-172	-3	101	-101				2	50	47
-8	155	164	-5	60	55	8,1,L			-1	83	83
-9	85	-88	-10	64	69	5	113	-122	-2	40	45
-11	45	-51	-12	42	-47	4	61	-62	-9	37	37
			-13	112	-113	3	101	106			

7,18,L	-3 119 123	-13 38 45	7,6,L
2 40 -36	-5 138 -136	7,9,L	4 66 67
-2 102 102	-7 174 170	5 58 -54	3 37 -42
-4 90 -91	-8 55 -55	4 28 -31	2 84 -82
-6 74 79	-9 93 -96	3 98 -99	0 268 269
-8 41 -37	-11 78 -78	2 48 -44	-1 289 283
7,17,L	7,13,L	1 58 -61	-3 173 -176
3 58 58	5 48 -46	0 122 -114	-7 107 -101
2 54 -50	4 46 44	-1 64 69	-8 115 -126
1 80 -80	0 123 117	-3 133 136	-9 119 -125
0 25 20	-1 112 -117	-4 160 164	-11 133 135
-5 73 76	-3 164 160	-5 173 166	7,5,L
-8 46 41	-7 89 -89	-6 111 -106	7 57 62
-9 74 -72	-8 119 -116	-7 114 -106	5 66 65
	-11 87 -82	-8 102 97	4 96 102
	-13 60 61	-10 67 73	3 57 54
7,16,L	7,12,L	-12 69 -71	1 120 121
4 96 -93	4 44 49	-14 68 72	0 148 -147
3 43 36	-1 62 -61	7,8,L	-1 132 -132
2 85 83	-2 97 -96	5 41 -48	-2 190 192
1 79 -81	-4 266 -260	4 27 -30	-3 89 -92
0 65 61	-5 154 157	1 133 129	-4 220 -232
-1 40 -40	-8 32 34	0 58 -58	-6 103 106
-2 60 -60	-10 85 83	-1 75 73	-7 77 80
-4 70 69	7,11,L	-2 202 202	-8 69 79
-6 59 -56	0 75 72	-4 52 -48	-10 140 -148
-7 46 -52	-2 73 -74	-5 164 -163	-11 67 67
-8 39 35	-4 227 -231	-7 80 -80	-14 55 57
-11 26 30	-5 105 -103	-8 175 178	7,4,L
7,15,L	-6 285 282	-10 79 -86	6 31 37
4 72 -68	-7 115 -121	-11 89 93	5 79 -80
2 71 64	-12 88 89	7,7,L	4 209 -212
1 65 -70	7,10,L	3 98 98	3 159 -159
0 56 58	4 60 52	2 69 69	2 95 94
-1 55 -58	3 54 -54	0 206 -208	1 188 184
-2 80 -79	0 69 71	-1 268 -274	0 241 237
-3 93 94	-2 148 -142	-3 324 340	-1 82 -84
-4 51 51	-4 328 -326	-4 286 297	-2 110 -114
-6 128 -133	-5 142 -143	-5 99 104	-4 118 138
-10 65 62	-6 241 243	-7 146 -139	-7 130 -145
7,14,L	-7 83 -77	-8 89 86	-8 87 -91
1 60 -62	-8 68 69	-9 87 88	-9 68 76
0 82 83	-9 156 163	-10 118 -119	-10 23 22
-1 78 76	-12 82 79	-11 59 -64	-11 41 42
-2 89 -92		-13 62 62	-13 25 -31
			-14 35 39

7,3,L			7,0,L			6,18,L			5	33	36
7	143	-151	6	117	126	4	60	-57	4	26	-28
8	41	43	4	148	-155	3	55	-51	3	98	-95
4	63	67	-2	342	-336	2	59	51	2	93	89
3	185	190	-6	66	-57	0	29	-35	1	142	-143
2	164	163	-8	116	103	-1	84	82	-1	114	109
1	276	-272	-10	146	-137	-2	61	-57	-4	94	92
0	121	-99	-14	40	43	-3	136	-130	-5	92	-93
-1	167	165				-4	38	-40	-6	61	62
-2	98	-96	6,24,L			-9	61	-60	-7	221	215
-6	67	55							-9	91	-87
-7	108	112	-2	88	86	6,17,L			-10	79	-80
-8	60	-52	-4	48	-46				-11	36	-38
7,2,L			6,23,L			3	101	-102	6,13,L		
5	109	121	-3	51	-44	2	58	67	5	73	74
4	49	-45	-4	78	-79	1	37	28	3	80	-82
3	57	-55	-5	64	67	0	133	-131	2	62	65
2	105	-103				-1	66	70	1	76	75
1	53	-51	6,22,L			-3	127	-130	0	72	74
0	125	-126				-4	56	57	-1	145	143
-1	27	30	-2	27	-31	-5	49	-48	-2	128	-129
-2	230	243	-5	59	66	-6	74	-69	-3	89	-89
-5	97	98	-6	48	52	-8	58	58	-4	111	-112
-7	87	88	-8	26	-22	-9	62	58	-6	135	-139
-11	110	-112				-10	36	35	-8	89	87
-13	102	-104	6,21,L			-11	44	55	-9	88	87
-14	66	-65				6,16,L			-10	52	58
-15	26	-31	0	30	22	5	75	-79	6,12,L		
7,1,L			-5	48	49	4	39	38	6	75	80
7	64	-73	-7	30	-34	-3	70	68	4	41	45
6	52	58	-8	55	-54	-4	44	49	3	86	-81
4	117	122	-9	90	-91	-5	69	69	2	116	-128
2	64	-67	6,20,L			-6	84	-88	1	37	38
1	52	48				-9	42	-42	0	101	-93
0	176	176	2	48	-46	-11	53	51	-2	67	-66
-1	82	-78	0	59	-63	6,15,L			-3	164	-160
-2	136	-138	-1	68	-69	3	126	127	-4	50	50
-6	67	64	-3	46	52	1	40	40	-5	273	265
-7	85	-80	-4	48	-48	-5	129	-123	-6	450	445
-8	120	119	-10	54	-55	-6	94	94	-7	175	-177
-9	31	-27	6,19,L			-9	89	89	-8	81	-76
-10	78	-80				-10	74	76	-10	57	-60
-11	26	-26	3	40	-35	-13	47	-52	-11	66	65
-12	123	-127	-3	55	53	6,14,L			-12	59	64
-15	32	-29	-8	99	100	6	86	89	-13	72	-69
			-9	31	32						
			-11	96	-92						

6,11,L			9	201	-245	3	52	47	4	37	-36
			10	233	-294	2	189	186	1	135	-129
4	44	-47	12	25	25	1	215	207	0	62	62
3	49	50	13	64	61	0	76	-79	-6	132	-122
2	108	110				-1	145	-137	-8	90	-92
1	120	-122	6,8,L			-3	264	-282	-9	125	118
-1	177	178				-5	118	-126	-10	55	57
-3	391	397	8	54	-54	-6	182	-179	-11	98	-97
-4	378	378	6	66	64	-8	89	-80	-12	79	84
-5	301	-297	4	60	56	-9	356	347	-13	159	-165
-6	447	-445	3	319	324	-11	125	-127	-14	73	67
-8	53	55	0	187	183	-12	65	62			
-9	66	68	-1	321	-313				6,2,L		
-10	41	43	-2	395	-394	6,5,L			7	62	63
-12	58	-56	-3	118	112				6	46	43
-13	67	70	-4	101	-97	8	42	-36	5	218	-224
-14	51	45	-5	432	-421	7	40	-45	3	24	26
6,10,L			-6	311	312	6	91	92	2	75	76
6	60	65	-7	119	119	5	73	-77	0	59	-63
4	29	33	-8	307	-304	3	71	70	-1	89	-88
1	80	82	-9	98	104	2	214	-210	-7	69	-56
0	126	-121	-10	65	69	0	82	83	-8	52	53
-1	123	118	-11	42	-51	-1	374	-370	-9	49	-51
-2	301	-299	-13	44	41	-3	112	124	-11	104	105
-3	184	-184	-14	64	-60	-9	181	183			
-4	435	440				-10	109	-105	6,1,L		
-5	118	117	6,7,L			-11	72	-71	6	23	17
-6	110	-113				-12	70	69	5	54	51
-7	133	134	5	61	62	-13	40	-43	3	111	-108
-9	152	-151	4	73	65	-15	27	26	2	80	-77
-10	98	97	3	137	-135	6,4,L			1	44	43
-12	129	-127	2	164	-160				0	140	142
-13	30	-33	1	67	-64	6	53	-47	-1	118	117
-14	64	64	0	73	-65	5	28	-29	-4	195	-184
6,9,L			-1	213	212	0	66	61	-5	86	85
8	96	102	-2	109	-112	-2	83	82	-7	51	44
6	57	-63	-3	152	-168	-3	96	110	-8	228	-219
5	57	-61	-4	133	131	-5	156	157	-9	34	-29
3	60	65	-5	305	-302	-6	55	-57	-10	94	92
2	127	-130	-6	114	112	-8	107	-102	-12	205	216
0	43	-37	-7	77	74	-9	59	56	-14	62	-68
-1	258	262	-8	253	-251	-10	156	-152	-15	64	68
-2	342	344	-9	179	174	-11	72	-68			
-4	194	-191	-10	86	91	-12	56	61	6,0,L		
-5	209	-209	-11	69	-72				8	58	64
-6	331	335	-14	42	-40	6,6,L			6	158	-166
-7	112	113							4	37	39
-8	144	-144	6	75	-79	6,3,L			0	50	43
			5	42	41						
			4	177	-179	7	85	88			
						6	56	-57			
						5	134	137			

6,0,L			5,20,L			2	59	-68	1	129	126
						0	104	107	-1	114	-114
-6	234	230	-8	92	92	-1	84	83	-2	98	92
-8	95	-93	-9	51	61	-2	54	46	-3	320	-322
-10	154	149	-10	35	35	-4	166	159	-4	39	-48
-12	250	252	-11	97	107	-6	72	-68	-11	80	85
						-7	259	-256	-12	47	43
5,25,L			5,19,L			-8	144	-133	-13	39	-38
						-9	53	58			
-2	114	-116	6	53	-54				5,12,L		
-3	56	-49	-1	79	79	5,15,L			8	25	27
-4	72	71	-6	207	215	5	67	68	6	34	37
			-7	75	-76	4	134	137	5	73	-66
5,24,L			-8	59	-68	3	48	49	4	153	-156
			-9	103	107	2	50	-47	2	77	77
-2	56	-55				1	237	-256	1	135	-141
-3	31	30	5,18,L			0	52	-49	0	94	-93
-5	82	79				-3	71	68	-3	416	409
-7	28	36	2	81	83	-4	235	-235	-4	103	104
			0	136	144	-5	333	-336	-6	171	-172
5,23,L			-1	102	110	-6	160	160	-7	30	-27
			-3	85	-83	-7	357	354	-11	56	-57
0	66	64	-5	139	-138	-10	140	-146	-12	59	-59
-5	50	-49	-6	85	91	-11	93	-96			
			-7	82	78	-13	47	48	5,11,L		
5,22,L			-8	126	-128				7	104	-112
			-10	66	63	5,14,L			6	64	-66
-2	63	-69	-11	86	86	6	70	-67	5	94	95
-6	33	33	-12	47	47	5	46	-46	3	40	-36
-7	38	-34				3	141	-150	2	150	153
			5,17,L			1	196	206	1	54	58
5,21,L			6	79	78	0	119	-120	-1	211	208
2	29	30	5	51	45	-1	81	-82	-3	303	-296
-3	43	40	4	47	-44	-2	138	131	-4	116	-116
-5	54	-64	-1	124	-134	-3	52	51	-6	99	-99
-7	57	54	-2	76	-68	-5	295	291	-7	62	61
-9	60	-54	-3	69	73	-6	174	-173	-8	109	107
-10	45	38	-4	127	132	-7	168	-169	-9	100	-100
			-5	228	231	-8	58	-53	-11	29	-27
			-6	95	-97	-9	82	-89	-13	69	-66
5,20,L			-8	184	184						
			-10	133	-135	5,13,L			8	64	67
5	64	60	-11	61	-61	7	56	-52	7	37	38
-1	53	-50	-12	108	-107	6	77	-78	6	42	-47
-4	90	-97				5	61	-60	5	118	119
-5	53	-51				4	40	45	4	46	58
			5,16,L			3	118	115	3	43	42
						2	58	51	2	189	-191
5,19,L			7	54	55						
0	49	-44	6	61	64						

5,10,L	-10	85	83	-1	212	196	-7	50	49
	-11	90	85	-2	237	205	-8	250	247
1 66 -66				-3	40	41	-10	267	270
0 50 -49	5,7,L			-4	158	142	-13	216	224
-1 155 -146				-6	298	286	-14	90	98
-2 133 -128	6 51 -57			-7	310	310			
-3 168 -156	4 106 -111			-8	32	24	5,2,L		
-4 117 116	3 141 134			-9	181	186			
-6 103 100	2 209 -206			-10	63	64	9 71 -70		
-7 146 147	1 76 -71			-11	62	60	8 48 50		
-9 32 31	0 116 108			-12	54	54	6 48 -51		
-12 33 -26	-2 479 444			-14	50	46	5 71 74		
-13 27 25	-3 140 126			-15	57	55	4 68 -62		
-14 26 -21	-5 149 153						3 105 -111		
	-6 88 -91	5,4,L					2 60 -53		
5,9,L	-7 79 78						0 85 76		
	-8 117 120	6 80 -86					-1 33 -31		
8 46 -37	-9 69 70	5 69 69					-2 197 -179		
7 82 -90	-11 70 -76	3 127 124					-3 315 289		
6 31 28	-12 24 28	2 158 153					-4 315 -290		
5 54 50	-15 55 59	1 67 -64					-5 256 242		
4 33 -35		0 234 216					-6 33 23		
3 143 -137	5,6,L	-1 247 -232					-7 33 27		
2 46 -46		-2 293 -265					-9 132 130		
1 75 75	8 51 53	-3 75 80					-10 285 288		
0 184 177	5 65 -75	-4 294 289					-11 380 -384		
-2 196 -189	4 163 158	-5 61 62					-12 111 -113		
-3 187 -176	3 132 126	-6 192 -183					-13 76 75		
-5 110 112	1 344 -331	-7 238 228					-14 99 -100		
-6 79 77	-1 277 258	-8 265 -272							
-8 98 -100	-2 705 666	-9 320 -325	5,1,L						
-10 164 161	-3 159 157	-10 284 291							
-11 37 31	-4 69 -65	-11 48 -48	4 85 -83						
-12 26 -19	-5 162 -153	-13 57 -54	2 70 64						
	-6 249 -248	-15 50 -47	1 97 -90						
5,8,L	-7 105 110		0 244 227						
	-8 125 127	5,3,L	-2 98 -95						
8 43 39	-9 168 -167		-3 297 257						
6 108 110	-10 137 -132	10 47 -52	-4 104 -91						
5 45 45	-14 37 35	7 87 -93	-5 36 -27						
4 264 -264		6 35 41	-6 33 -34						
3 67 -68	5,5,L	4 91 85	-7 207 -193						
2 202 201		3 33 -30	-8 163 157						
1 76 69	9 54 -52	2 166 167	-9 80 -81						
0 119 -111	8 48 49	1 87 78	-11 229 -225						
-1 38 -35	7 51 53	0 54 52	-12 99 -98						
-3 279 -277	5 129 128	-1 149 -129	-13 43 41						
-4 142 141	4 94 -93	-2 266 -242	-14 106 109						
-5 185 179	3 38 40	-3 98 -108	-15 91 90						
-6 86 -86	2 167 163	-4 24 -14							
-8 48 49	1 147 -136	-5 49 -41							
-9 87 83	0 91 80	-6 56 -54							

5,0,L			4,22,L			0	43	46	4	116	115
						-1	65	73	3	69	-66
4	55	-54	4	38	-29	-2	29	32	2	134	142
2	69	-71	3	53	46	-4	118	126	1	70	69
0	168	-172	1	60	-66	-7	76	75	-1	75	74
-2	265	-259	0	67	-66	-8	143	-143	-2	49	-45
-4	192	-174	-1	40	44	-9	193	-194	-3	60	-64
-6	442	407	-2	80	-85	-10	70	-73	-4	220	-221
-8	161	165	-3	120	-127	-12	65	-59	-5	113	-116
-10	230	-235	-4	69	65	4,18,L			-6	73	-71
-12	52	58	-5	51	49	8	45	-42	-7	144	149
-14	279	-292	-6	118	115	7	46	37	-9	106	105
4,27,L			-7	139	131	6	35	-37	-10	86	90
			-8	57	-60	3	36	-31	-13	51	53
-2	78	-70	4,21,L			2	145	156	4,15,L		
4,26,L			5	43	40	0	181	-188	9	46	44
			0	24	-27	-1	69	-73	8	61	-65
1	67	63	-1	49	53	-2	45	-47	7	81	-85
-1	63	72	-2	69	74	-3	29	-29	5	66	68
-3	51	-51	-4	28	25	-6	191	-193	4	42	-41
-4	64	67	-6	61	-60	-8	103	94	2	36	36
4,25,L			-7	94	-93	-10	30	-31	1	43	38
			-8	24	25	-12	52	-51	0	62	-69
1	54	56	-10	85	-85	4,17,L			-1	86	80
-1	61	62	4,20,L			8	60	59	-2	104	-99
-2	94	96	7	50	53	7	35	30	-3	114	-116
-4	60	-53	6	88	-76	6	75	-76	-4	171	167
-6	55	-57	4	34	28	4	82	79	-5	124	130
-7	35	31	2	67	-69	3	66	-64	-6	70	-75
4,24,L			1	79	87	2	154	-173	-7	40	44
			0	47	59	0	62	-47	-8	38	-40
1	25	24	-1	111	-116	-1	56	-53	-9	40	42
-2	111	112	-2	127	-143	-2	102	104	-10	187	199
-3	86	84	-3	58	-61	-3	50	-52	-12	34	37
-5	66	-66	-4	140	150	-4	63	-58	-13	67	-60
-7	34	-28	-5	42	40	-5	140	-149	4,14,L		
4,23,L			-7	74	-74	-6	245	248	8	41	41
			-9	135	132	-7	113	121	7	115	-114
4	54	45	-10	67	64	-8	137	-147	2	55	55
2	55	51	4,19,L			-10	50	-49	1	57	62
0	32	-36	7	82	86	-12	67	69	0	113	113
-1	24	31	6	78	69	4,16,L			-1	114	115
-2	42	-33	5	47	-48	8	37	-36	-2	141	140
-5	113	-116	3	109	-115	7	33	-35	-3	126	125
-6	44	-42	2	58	-55	6	82	-83	-4	42	50
-9	57	60	1	47	-54	5	122	-123	-5	172	-178
									-7	27	-26

4,14,L	5	39	41	-3	322	309	4,6,L			
	4	44	-35	-4	76	-78				
-8 63 -65	3	79	-87	-5	33	37	7	71	71	
-9 120 132	2	81	-80	-6	36	42	6	106	-108	
-11 71 -73	0	95	86	-7	172	-170	4	150	142	
-12 39 41	-1	72	-64	-10	96	-94	3	64	-65	
	-3	118	123				2	106	101	
4,13,L	-4	93	92	4,8,L			1	201	184	
	-5	130	-139				0	45	-45	
6 41 41	-6	42	-39	10	81	81	-2	334	-321	
8 133 128	-7	52	46	8	68	-69	-3	655	-631	
3 61 -63	-11	39	-36	7	42	37	-4	357	-332	
2 129 130	-13	39	40	6	225	-220	-5	268	263	
1 83 -87	-14	28	25	5	254	244	-6	232	-224	
0 56 -48				4	154	157	-7	238	220	
-1 200 191	4,10,L			3	48	-45	-9	205	-204	
-2 92 -91				2	154	137	-13	102	106	
-3 32 -24	10	46	-43	1	119	-115	-14	31	24	
-4 90 -101	9	75	75	0	167	-159	-15	38	-45	
-5 228 224	8	38	33	-1	68	-70				
-7 44 -40	7	79	-80	-2	97	91	4,5,L			
-12 35 35	6	91	95	-4	84	86	7	50	-50	
	5	58	-52	-5	80	-75	6	124	-126	
4,12,L	4	175	-173	-6	48	-47	5	137	132	
	3	46	41	-7	207	-200	4	40	38	
10 33 36	1	98	-95	-8	189	-188	3	66	-57	
9 25 21	0	122	121	-9	67	70	1	223	-192	
8 59 68	-1	35	37	-10	57	62	0	92	-77	
7 126 131	-2	42	-35	-13	53	-53	-1	211	-194	
6 23 -25	-3	41	41	-15	43	46	-2	74	-71	
5 138 -138	-5	51	-45				-3	442	-429	
4 47 40	-7	45	48	4,7,L			-4	314	-295	
3 61 65	-8	145	142				-5	38	-31	
1 80 72	-9	91	-91	10	53	-50	-6	225	216	
0 238 -225	-11	49	53	8	52	53	-7	137	138	
-2 35 38	-12	45	41	6	178	175	-8	182	171	
-4 187 181	-14	66	-68	3	160	-151	-9	59	54	
-5 46 51				2	94	87	-10	79	81	
-6 75 78	4,9,L			1	47	-47	-11	51	45	
-8 52 50				0	71	-79	-12	48	47	
-9 38 -45	10	52	49	-1	180	172	-13	102	-101	
-10 40 -34	9	52	-53	-2	456	-436				
-11 72 -74	8	32	-34	-3	436	-411	4,4,L			
-12 49 51	6	85	-81	-4	326	315	9	96	-101	
-13 -46 -43	5	69	-68	-5	71	77	7	113	-108	
-14 54 47	4	146	141	-6	87	85	6	44	40	
	3	56	-46	-7	39	-30	5	105	-106	
4,11,L	2	81	-81	-8	44	-41	4	29	-28	
	1	174	169	-10	49	-50				
9 49 -50	0	84	-82	-12	116	-112				
7 158 163	-1	66	-63	-13	54	-59				
6 76 79	-2	293	281	-14	76	-78				

4,4,L			4	159	-153	6	292	-290	3,23,L		
3	149	-149	3	175	172	4	317	303	5	90	-96
2	111	107	2	246	227	2	203	-204	3	38	33
1	83	73	1	167	-166	0	48	50	0	23	-22
0	83	-72	0	271	-255	-2	686	-607	-2	36	29
-1	106	99	-1	396	370	-4	843	765	-3	69	-74
-3	620	570	-2	170	157	-6	230	-219	-4	58	-61
-4	190	-186	-3	68	74	-8	51	51	-5	51	51
-5	42	-46	-4	413	381	-10	445	451	3,22,L		
-6	240	230	-5	230	215	-12	279	-280	7	85	-80
-7	263	-246	-6	213	204	-14	69	66	6	25	-19
-8	81	-75	-7	128	-119	3,28,L			3	72	70
-9	90	90	-8	108	113	-2	91	91	2	35	-34
-10	163	-166	-9	196	-193	3,27,L			-1	54	-59
-11	150	152	-10	161	-165	-2	36	36	-2	102	105
-13	28	-36	-12	87	-88	3,26,L			-3	117	123
-14	42	-42	-13	77	-83	3	56	53	-5	68	71
-15	74	78	-14	86	90	2	42	-43	-6	24	-25
4,3,L			4,1,L			1	60	-64	-7	75	-79
10	67	65	10	64	69	0	49	52	-8	58	57
8	72	-76	9	68	-72	-1	29	28	3,21,L		
7	82	83	8	50	50	-2	89	-92	7	30	31
6	33	32	7	120	121	-5	67	65	5	45	-46
4	175	-176	5	49	45	-6	93	-91	1	137	146
3	68	-63	4	122	116	-7	59	-65	0	132	135
2	92	90	3	147	-142	3,25,L			-3	52	-60
1	181	-173	2	52	-55	4	86	-82	-9	41	-42
0	46	-43	1	241	223	3	84	-84	3,20,L		
-1	229	221	0	66	-66	1	70	-76	8	59	-49
-2	109	108	-1	506	448	-2	87	-86	7	43	43
-3	567	537	-2	304	274	-3	85	-85	3	55	-53
-6	572	-541	-3	211	-189	-5	33	-33	2	89	95
-7	169	150	-4	521	-447	-6	25	22	1	69	-77
-8	354	356	-5	25	-14	-7	56	56	0	34	-44
-5	426	-387	-6	80	72	-8	69	67	-3	32	35
-9	126	128	-7	154	-149	3,24,L			-4	43	41
-10	155	161	-8	141	148	4	60	51	-5	46	-49
-11	230	-239	-9	198	-195	2	34	-32	-6	76	-81
-12	40	-46	-10	313	-317	0	106	-106	-7	123	129
-13	133	136	-11	370	380	-2	36	-32	-8	120	123
-14	83	80	-12	255	255	-3	42	46	-10	80	-84
-15	88	-89	-13	58	54	4,0,L					
4,2,L			-14	100	-101	10	153	155			
11	72	-72	-15	81	-83	8	54	58			
10	32	35									
9	93	95									
5	222	-231									

3,19,L	3	89	96	-2	116	-123	-14	79	-72		
	2	99	-110	-3	230	218					
6	50	-49	1	52	55	-5	26	-23	3,11,L		
2	43	-53	0	49	40	-6	91	-98			
1	81	87	-1	61	-57	-9	228	-258	9	45	-50
-2	90	94	-2	81	75	-12	49	-51	8	70	78
-4	165	-172	-3	131	133				7	135	-137
-8	70	72	-4	49	-53	3,13,L			6	230	-226
-9	71	66	-5	77	83				5	117	-124
-10	45	49	-6	29	-40	9	110	-109	4	182	176
			-7	187	-196	8	23	27	3	69	70
3,18,L			-8	28	43	5	51	49	2	116	105
			-10	42	-46	4	50	51	1	267	250
7	51	-57	-12	64	64	3	51	-53	0	128	-118
4	91	93	-13	77	-70	2	303	-294	-1	149	-131
0	23	-24				1	127	126	-2	165	152
-1	64	-57	3,15,L			0	43	-34	-3	169	-145
-2	112	112				-1	194	-187	-4	107	-111
-3	237	-238	10	42	44	-2	160	184	-5	37	35
-5	46	46	8	74	74	-3	204	-191	-7	76	-81
-6	45	49	7	157	159	-4	138	-133	-8	38	-37
-7	114	113	6	82	78	-5	33	-34	-10	102	113
-8	50	-56	5	146	-154	-8	32	33	-11	42	-48
-9	39	40	4	36	-28	-9	122	-133	-12	46	-52
-10	166	171	3	56	-58	-10	56	65	-13	64	69
			2	107	-102	-11	66	68	-14	40	-40
3,17,L			1	158	149	-13	51	47			
			0	30	33	-14	59	53	3,10,L		
8	62	-68	-1	83	-84				10	68	66
7	77	-79	-2	125	125	3,12,L			9	49	-52
6	113	116	-3	92	-94				6	224	-221
4	49	-55	-4	55	-56	9	83	-85	5	173	177
2	113	126	-5	60	-55	8	23	-22	3	61	-63
1	65	-67	-6	37	33	7	137	-133	2	31	-26
0	52	55	-7	83	89	6	115	-114	1	94	89
-1	182	177	-9	64	-66	5	152	148	0	210	-195
-2	274	-264	-10	176	-191	4	87	-85	-1	109	-110
-3	47	44	-11	75	-80	3	126	125	-2	132	133
-4	209	213	-13	31	35	2	142	-137	-3	129	-128
-5	222	230				1	199	-194	-4	163	166
-6	135	-138	3,14,L			0	101	-95	-5	119	108
-7	49	-51				-1	200	192	-6	68	-63
-10	135	141	8	51	55	-2	292	279	-7	99	93
-11	87	91	7	67	65	-3	148	-147	-8	34	33
-12	58	-61	6	92	86	-4	45	-43	-10	46	48
			5	143	-137	-5	58	-53	-12	103	-102
3,16,L			4	85	81	-7	36	38	-13	50	49
			3	32	29	-8	34	28			
7	36	35	2	194	-189	-9	23	23			
6	78	77	1	131	123	-10	91	98			
5	37	-35	0	100	-104	-12	73	-82			
4	73	74	-1	90	-81	-13	31	31			

3,9,L	3	39	-41	4	159	-140	5	152	-141		
	2	33	-29	3	334	-311	4	112	104		
6	111	116	1	162	151	2	69	62	3	263	250
8	137	139	0	121	106	1	661	622	1	60	-52
4	294	-288	-1	47	-50	0	221	205	0	323	-294
3	47	46	-2	67	-66	-1	438	423	-1	223	-196
2	165	143	-3	218	207	-2	36	36	-2	625	593
1	106	-94	-4	66	-59	-3	213	-202	-3	697	-658
0	290	246	-5	149	138	-5	96	90	-4	310	-294
-2	161	-158	-7	374	355	-6	210	212	-5	402	376
-3	179	-156	-8	180	171	-7	189	182	-7	180	-170
-4	230	225	-9	87	-92	-8	211	-202	-9	77	-69
-5	104	103	-10	77	-76	-9	54	-47	-10	47	-42
-6	116	-103	-11	97	-95	-10	82	-90	-11	172	172
-8	69	61	-12	60	64	-11	132	129	-13	131	-134
-10	41	-44	-13	121	124	-12	48	-48	-14	50	-47
-11	105	-106	-15	90	-89	-14	47	-44			
-12	41	-35									
-15	62	57									

			3,6,L			3,4,L			3,2,L		
			12	59	-58	11	76	-80	12	45	-42
			10	58	-58	10	123	125	11	29	26
10	75	-70	9	108	110	8	198	-207	9	141	-145
8	130	133	8	96	95	6	101	93	7	56	-59
7	160	160	7	143	-144	5	275	264	5	154	140
6	183	185	5	58	58	4	503	482	4	63	58
5	208	-207	4	109	104	3	56	-52	3	280	260
4	26	-25	3	208	198	2	485	-457	1	179	169
3	147	-145	1	620	-569	1	163	143	0	476	-452
2	70	71	0	432	406	0	99	109	-1	547	-515
1	220	205	-1	308	288	-1	482	450	-2	308	277
0	399	-356	-2	62	51	-2	482	440	-3	156	143
-1	606	-578	-3	74	67	-3	137	117	-4	194	-171
-2	248	240	-4	262	242	-4	192	-183	-5	33	37
-3	104	-98	-5	118	115	-5	275	-258	-6	146	-141
-4	71	-64	-6	253	-241	-6	334	-320	-7	164	-156
-5	37	37	-7	370	-343	-7	114	107	-11	49	45
-6	47	54	-9	111	106	-8	104	-94	-12	60	-63
-7	44	42	-10	162	163	-9	217	-221	-15	51	-47
-8	46	39	-11	153	159	-10	123	124			
-9	209	208	-13	49	-50	-11	271	-282			
-11	124	127	-14	131	137	-12	75	81			
-12	50	52	-15	45	41	-13	99	100			
-14	134	-137				-14	48	44			

			3,5,L			3,3,L			3,1,L		
			12	90	92				12	37	-44
			11	100	102				10	139	143
10	51	53	9	74	-74	11	58	-54	9	40	38
8	80	-83	8	45	48	10	81	-85	8	90	-96
7	46	46	6	57	51	9	118	120	7	25	30
6	112	-115	5	106	-103	8	171	171	6	108	-108
4	160	-149				7	72	71	5	90	-85
									4	142	139
									3	109	-111
									2	177	181

3,1,L	-2 55 57	2,21,L	5 66 -67
1 60 55	-3 56 55	8 53 54	1 141 -141
0 108 -104	-6 42 40	6 48 52	0 90 -93
-1 300 -283	-7 53 -49	4 38 43	-2 52 52
-2 779 -718	2,23,L	3 60 -64	-3 336 348
-3 54 -57	6 80 -75	2 27 -31	-4 216 -221
-4 196 169	5 113 -110	1 68 -72	-5 70 -63
-5 154 -143	4 54 50	0 126 -125	-6 63 -60
-6 45 -44	1 171 176	-2 33 34	-7 87 -89
-7 144 132	0 51 -53	-6 46 -49	-8 71 70
-8 39 38	-1 57 -57	-8 29 26	-9 52 54
-9 28 24	-5 83 82	-11 39 38	-10 91 -87
-10 124 133	-6 68 69	2,20,L	2,17,L
-11 163 -169	-7 70 -64	7 37 42	10 43 -36
-12 34 35	2,24,L	6 86 -85	7 40 41
3,0,L	6 37 30	5 49 50	6 45 46
12 156 157	2 61 64	4 64 -71	5 27 33
10 97 -100	1 107 108	3 60 -63	4 127 -128
8 179 -183	0 42 40	1 70 75	3 74 -72
4 356 -346	-1 100 103	0 70 -66	2 57 -60
2 147 140	-2 44 48	-1 128 -124	1 51 48
0 266 -249	-4 26 -28	-3 52 -53	0 52 52
-2 213 -210	-5 48 -45	-4 70 71	-2 49 56
-4 701 641	-7 33 -23	-5 63 64	-3 82 -83
-6 25 -23	2,23,L	-8 36 36	-4 37 34
-8 100 99	5 51 59	2,19,L	-7 70 -73
-10 256 -257	4 37 32	7 51 -49	-10 57 -58
-12 41 38	1 65 64	5 42 -41	-12 49 42
2,28,L	-1 142 138	4 47 -53	2,16,L
2 92 -91	-3 102 -100	3 76 81	10 25 20
-2 62 -62	-6 51 45	2 78 82	9 63 -65
-3 58 56	-7 70 -66	1 81 -85	7 42 48
2,27,L	-9 31 28	0 28 31	5 89 -85
0 43 -53	2,22,L	-1 116 -117	4 63 61
-2 44 -46	5 63 60	-2 61 -59	3 58 -63
-3 55 55	2 76 -77	-4 221 229	2 46 -48
-5 46 47	1 59 -64	-7 31 38	0 106 103
2,26,L	-1 125 130	-8 96 -108	-1 74 78
4 34 39	-2 100 102	-9 49 -50	-2 310 -308
3 90 -85	-3 166 -169	-10 51 -49	-3 238 -245
1 90 93	-4 55 55	2,18,L	-4 41 51
0 84 -88	-5 45 -40	9 68 65	-7 91 94
-1 38 -40	2,18,L	8 37 -42	-8 36 -43
	9 68 65	7 57 -62	-13 43 40
	8 36 32	6 36 32	2,15,L
			10 37 -28

[illegible]

2,7,L	-7	239	-239	-5	60	55	-5	38	35
	-8	192	189	-6	436	438	-7	210	-195
-12 120 -125	-9	211	-215	-7	96	85	-9	50	-45
-13 64 -63	-10	80	80	-8	34	34	-10	38	-69
-14 56 61	-11	39	-45	-9	78	80	-11	164	164
-15 49 39	-12	45	46	-10	29	-31	-12	39	35
	-15	39	-45	-14	34	37			

2,6,L

2,4,L

2,2,L

2,0,L

11 134 134	13 45 -40	12 35 -36	12 74 75
9 89 -93	12 23 -21	10 28 25	6 74 65
8 73 74	11 75 -74	9 97 -92	4 34 33
7 134 132	10 127 -133	8 42 -42	2 199 -207
6 106 99	9 66 66	7 72 -73	0 801 845
4 151 155	8 122 121	6 164 -158	-2 942 987
3 448 -432	7 40 -45	4 70 68	-4 80 -83
2 205 196	6 207 202	3 89 -89	-6 215 -213
1 209 194	4 114 -108	2 220 219	-8 26 30
0 784 -798	2 31 -25	1 165 159	-10 22 19
-1 237 -225	1 130 130	0 128 -118	-12 120 -124
-2 274 -268	0 182 -180	-1 1273 1405	
-3 308 309	-1 474 -484	-2 625 585	1,29,L
-4 444 -409	-2 985 -1061	-3 585 -599	1 41 36
-5 156 154	-3 72 -66	-4 289 -291	-2 40 -40
-6 40 -41	-4 250 247	-5 59 -61	
-7 168 -165	-5 142 -126	-6 94 89	1,28,L
-8 139 126	-6 223 208	-7 90 94	3 25 22
-9 151 156	-7 25 -22	-8 243 239	2 71 73
-10 201 -203	-8 47 33	-9 167 -168	0 50 -55
-11 54 -64	-9 138 133	-10 77 -71	
-13 56 56	-11 112 114	-11 38 38	1,27,L
-15 76 -75	-12 40 -41	-12 47 45	3 43 44
	-13 40 -42	-14 47 48	1 36 41
	-14 33 -33	-15 54 52	0 51 -48

2,5,L

2,3,L

2,1,L

13 72 68	9 32 -31	12 59 62	3 43 44
12 42 -38	8 35 26	11 33 35	1 36 41
10 52 54	7 76 -74	10 33 -42	0 51 -48
9 56 -55	6 99 -100	9 94 96	-2 52 56
8 138 -141	5 76 -77	6 182 -174	-3 41 -39
7 42 40	4 235 -231	4 261 242	1,26,L
6 156 -159	3 247 -231	3 118 104	6 73 75
4 299 288	2 65 58	2 503 -508	5 43 -40
3 116 -115	1 164 182	1 42 50	3 96 100
2 265 229	0 627 613	0 108 104	2 109 -108
1 43 -42	-1 450 414	-1 388 369	1 33 -30
0 510 -507	-2 456 -466	-2 1414 1427	0 44 48
-1 771 -802	-3 244 -256	-3 581 569	-1 69 67
-2 359 -358	-4 318 -302	-4 223 -215	-2 49 -45
-3 39 35			-5 60 -60
-5 461 454			
-6 93 -85			

1,26,L	-1	62	-70	1,18,L	-8	208	225
-6 47 -45	-2	60	58	-9	48	53	
1,25,L	-3	73	76	-11	73	-72	
7 46 -46	-4	95	-99	8 39 -37			
6 72 71	-5	45	47	7 41 43			
3 28 28	-6	97	102	6 123 131	1,15,L		
2 48 -45	-8	40	-41	5 34 35	9 82 84		
1 84 -89	-9	86	77	4 90 -96	8 90 81		
0 50 46	-10	28	-25	3 69 73	7 142 141		
-1 91 95	1,21,L			1 187 -187	6 55 -55		
-2 61 -63	6 64 -68			0 184 155	5 295 -299		
-3 57 -53	4 161 -168			-1 156 -146	4 235 -236		
-5 112 -112	3 158 166			-2 49 -54	3 86 90		
-7 49 50	2 66 70			-3 59 -63	2 138 141		
1,24,L	0 171 167			-5 90 89	1 129 125		
7 39 40	-1 116 -119			-6 73 79	0 59 62		
4 35 -37	-6 37 35			-7 163 166	-1 164 -166		
3 54 52	1,20,L			-9 92 -99	-2 81 74		
2 93 -97	6 131 -139			-10 63 62	-3 378 361		
1 52 49	4 161 169			-12 35 30	-4 160 161		
0 100 -97	3 51 -50			1,17,L	-5 148 -148		
-1 145 -146	2 38 39			11 36 39	-6 148 -152		
-2 32 -30	1 49 49			10 32 28	-7 109 -97		
-3 36 38	-1 90 -95			9 49 -56	-8 38 -43		
-4 107 104	-2 366 376			5 79 79	-10 45 48		
-5 55 -55	-3 67 -69			4 89 -88	-11 26 19		
-8 60 -51	-4 72 -71			3 265 -274	-13 87 -81		
1,23,L	-5 127 131			2 169 172	1,14,L		
6 58 53	-6 82 -82			1 202 201	11 104 100		
5 91 -92	-7 47 44			-2 32 -30	9 34 40		
2 231 -240	-10 87 -91			-3 30 -32	8 63 -65		
1 132 133	1,19,L			-4 23 25	7 319 -325		
0 60 62	9 55 53			-5 141 148	6 61 64		
-1 322 -330	6 89 -95			-6 212 -219	5 534 558		
-2 89 89	4 138 144			-8 187 186	4 85 84		
-4 65 69	1 104 103			-9 80 88	3 76 -76		
-5 65 67	-1 162 161			1,16,L	2 60 56		
-8 66 -60	-2 154 158			11 49 -45	1 121 -115		
-9 57 52	-3 73 -77			8 55 60	0 79 -92		
1,22,L	-4 297 -313			4 312 310	-1 229 221		
3 60 49	-5 133 138			3 91 93	-2 256 -255		
2 146 -150	-6 43 -42			2 108 -115	-3 216 -212		
0 106 113	-7 42 -46			1 98 -99	-4 106 104		
	-10 40 38			0 289 -289	-6 26 -29		
				-2 44 44	-7 86 -92		
				-3 131 130	-8 120 -124		
				-4 126 -131	-9 140 -146		
				-5 91 90	-13 63 58		
				-7 71 -74			

1,13,L			10	103	-102	3	275	-283	-1	102	114
9	111	109	9	158	163	2	119	-116	-2	618	-641
8	203	201	8	183	188	-1	338	342	-3	248	247
7	93	95	7	161	-173	-3	23	-22	-4	89	97
6	125	125	6	181	-180	-5	27	36	-5	160	148
5	352	-354	5	90	86	-6	159	-155	-6	84	89
4	186	-181	4	44	43	-7	94	88	-7	40	39
2	337	-333	2	127	110	-8	135	140	-9	79	-75
1	111	-105	1	540	-513	-10	170	176	-10	86	-84
0	36	-26	0	130	-119	-11	127	-128	-11	53	48
-1	68	65	-1	86	-87	-12	32	-34			
-2	191	185	-2	98	92				1,6,L		
-3	74	-65	-3	59	-52	1,8,L			13	89	87
-4	24	20	-4	51	-59	12	86	88	10	27	29
-5	21	-22	-5	38	-26	11	112	102	9	163	163
-6	27	21	-6	86	81	10	98	-103	7	133	137
-7	73	-78	-8	99	102	9	215	223	6	267	268
-8	156	-155	-9	81	77	8	52	61	5	617	-610
-9	122	-128	1,10,L			7	247	-249	4	144	140
-11	37	37	12	110	109	6	263	254	3	343	333
-12	40	35	11	71	75	5	247	-254	2	84	-73
1,12,L			10	35	-35	4	282	-282	1	678	-706
12	126	121	9	175	-172	3	137	-141	0	387	-398
11	80	-73	8	370	-370	2	637	634	-1	557	575
10	90	-90	7	190	-191	1	167	-160	-2	664	-711
9	94	-89	6	76	-78	0	66	-60	-3	499	514
8	272	-281	5	47	-53	-1	56	64	-4	533	543
7	272	280	4	465	463	-2	180	191	-5	341	-313
6	45	45	2	350	-325	-3	64	69	-6	23	29
5	117	-115	1	220	211	-4	45	52	-7	95	92
4	282	-274	0	312	309	-6	159	136	-8	84	80
2	78	70	-1	19	-28	-7	51	62	-9	49	-56
1	388	391	-3	115	106	-9	120	123	-10	226	231
0	208	213	-6	33	33	-10	152	-158	-11	44	-34
-1	249	-252	-7	87	87	-11	105	-111	-12	56	57
-2	161	-147	-8	93	-92	1,7,L			-14	41	-37
-3	324	-326	-9	109	108	12	82	-75	1,5,L		
-4	208	-205	-11	75	74	11	46	-43	12	69	-73
-5	135	141	-12	42	-41	10	104	-105	10	79	83
-7	40	32	1,9,L			9	167	161	9	49	47
-8	38	33	13	90	-84	8	198	203	8	157	-161
-9	135	-139	11	82	-82	7	65	65	7	49	-52
-10	81	-82	9	158	157	6	158	159	6	179	189
-11	35	31	8	415	-421	5	406	-411	5	474	-481
1,11,L			7	78	76	4	198	-189	4	394	376
12	87	-87	6	177	174	3	440	439	3	326	331
11	72	-79	5	268	260	2	443	458	2	883	-961
			4	323	317	1	84	-81	1	393	407
						0	428	-433			

1,5,L
 0 416 416
 -1 463 478
 -2 224 226
 -3 153 149
 -4 130 -121
 -5 620 -620
 -6 323 312
 -7 97 80
 -8 125 -127
 -9 243 258
 -10 102 -101
 -11 83 91
 -12 57 66
 -13 97 -102

4 260 244
 3 118 -120
 2 544 -577
 1 1802 1840
 0 167 159
 -1 1022 -1017
 -3 35 36
 -4 141 148
 -5 241 225
 -6 125 124
 -7 526 -501
 -8 250 -241
 -9 109 93
 -10 78 76
 -11 35 -36
 -12 61 -62
 -15 25 26

4 50 49
 3 193 190
 2 244 -242
 1 416 -421
 0 378 -374
 -1 547 -565
 -2 257 -254
 -3 690 -729
 -4 168 165
 -5 42 42
 -6 178 -167
 -7 292 280
 -8 53 57
 -9 81 81
 -10 62 -65
 -11 41 -43
 -12 65 -67
 -13 68 -68

0,25,L
 -1 33 -33
 -3 69 67
 -4 71 74
 -6 52 54

0,24,L
 0 38 40
 -1 52 -57
 -2 97 103
 -4 31 -32
 -6 30 -28

0,23,L
 -1 31 -35
 -2 97 -98
 -3 132 138
 -6 24 20
 -7 44 -45
 -9 50 48

1,4,L

1,2,L

1,0,L

13 35 35
 12 26 26
 9 94 -100
 8 47 -44
 6 322 330
 5 216 -214
 4 342 351
 3 284 286
 2 1149 -1204
 1 1395 1376
 0 370 362
 -1 305 -311
 -2 461 471
 -3 32 -6
 -4 414 -405
 -5 331 -311
 -6 39 43
 -7 67 -64
 -8 106 114
 -9 95 -97
 -10 68 -64
 -11 70 73
 -12 50 52
 -14 77 82

10 48 51
 9 88 -82
 7 130 126
 5 456 452
 4 145 -143
 3 237 237
 2 322 -322
 1 550 560
 0 230 225
 -1 447 -470
 -2 407 408
 -3 460 -482
 -4 19 12
 -5 267 -264
 -6 128 125
 -7 471 -449
 -8 353 -344
 -9 219 211
 -10 98 -101
 -11 60 -65
 -15 51 -46

10 91 -102
 8 36 -39
 6 419 -412
 4 364 354
 2 545 -557
 0 1356 -1336
 -2 1271 1234
 -6 84 -87
 -8 53 46
 -10 218 -221
 -12 141 142
 -14 80 -81

0,22,L
 0 92 90
 -1 77 81
 -2 153 158
 -3 105 -107
 -4 74 -77
 -5 57 -59
 -6 94 -98
 -9 45 -48

0,28,L

0,21,L

0 69 -72
 -1 35 32
 -4 50 46

-1 22 18
 -2 137 -138
 -3 200 -212
 -4 44 43
 -5 108 109
 -6 108 -112
 -7 66 67
 -9 38 -35
 -10 29 -34

0,27,L

-3 40 36

0,26,L

0 90 94
 -1 70 69
 -2 53 -57
 -4 42 -35
 -5 24 -21
 -6 39 42

0,20,L

0 491 507

1,3,L

1,1,L

11 87 91
 9 38 -32
 8 45 37
 7 31 18
 6 172 157
 5 253 -247

14 46 -44
 11 45 -50
 10 98 101
 9 63 -66
 8 23 18
 7 36 -25
 6 331 309
 5 126 121

0,20,L	-3 39 42	-3 286 -290	0 139 142
-1 120 117	-4 85 -94	-4 225 211	-1 194 194
-2 336 -356	-5 99 103	-6 91 97	-2 408 -396
-3 151 156	-6 152 156	-8 54 -49	-3 331 338
-4 62 -58	-7 96 -100	-9 120 122	-4 234 -238
-5 40 43	-9 89 -88	-12 42 -39	-5 207 197
-6 77 80	-10 47 -47		-6 171 165
-7 52 -53	-11 23 28	0,11,L	-7 28 24
-8 104 -104	-12 53 49	-1 193 190	-8 56 -58
-9 72 -75	0,15,L	-2 56 47	-9 107 -106
-10 78 78	-1 91 91	-3 198 187	-11 86 83
	-3 31 -25	-5 64 -57	-13 47 -48
0,19,L	-4 157 -159	-8 114 -112	-14 50 48
-1 348 -358	-6 88 91	-9 35 34	0,7,L
-2 123 -127	-7 209 -218	-10 125 -125	-1 332 -332
-3 307 316	-8 152 156	-11 105 107	-2 35 -25
-4 41 46	-10 72 -76	-13 55 -57	-3 364 378
-5 104 -107	-11 49 49	0,10,L	-4 92 -91
-7 38 37	0,14,L	0 281 293	-5 81 -81
-8 32 33	0 252 -248	-1 242 238	-6 71 -65
-10 55 53	-1 281 -281	-2 450 443	-7 301 -296
-11 66 -59	-2 96 -95	-3 192 190	-8 154 158
0,18,L	-3 80 78	-4 250 -235	-9 77 75
-1 232 231	-5 67 -66	-5 127 -130	-11 41 -41
-2 21 -20	-6 140 140	-6 154 -159	-12 52 80
-3 359 371	-7 154 -162	-7 72 -75	0,6,L
-4 52 -59	-8 177 175	-8 151 150	0 272 -285
-5 43 -43	-9 194 201	-9 123 -129	-1 347 355
-6 70 68	-10 61 -61	-10 128 -132	-2 421 -429
-7 60 -59	-11 77 78	-11 58 -58	-3 459 -455
-9 40 41	0,13,L	-12 29 28	-5 124 -112
-11 33 -19	-1 48 56	0,9,L	-6 53 54
0,17,L	-2 150 -145	-1 32 -27	-7 301 305
-1 28 30	-4 83 87	-2 139 134	-8 117 119
-3 204 215	-5 57 53	-3 344 -336	-9 82 84
-4 353 -366	-6 68 64	-4 111 109	-10 98 -98
-5 175 -181	-7 45 -42	-5 185 180	-11 43 -46
-6 290 304	-8 166 167	-6 32 -42	-12 31 -33
-7 65 -62	-9 117 120	-7 53 -50	0,5,L
-11 40 -43	-12 57 -55	-8 286 -291	-1 29 -33
0,16,L	0,12,L	-9 30 -32	-2 403 431
0 22 -23	0 197 207	-10 31 -35	-3 51 -41
-1 73 -73	-1 135 -143	-11 135 134	-4 53 61
-2 88 -86	-2 65 71	-12 22 11	-5 117 106
		0,8,L	-6 99 -95

0,5,L	-8	180	179	0,2,L	-3	675	724				
	-9	115	113		-4	409	426				
-7	127	-120	-10	25	-26	-5	115	116			
-8	51	-49	-14	70	-70	-7	125	125			
-9	203	-205				-8	115	107			
-10	87	92	0,3,L	-3	1315	-1324	-9	30	30		
-12	100	-108		-4	59	-58	-11	45	-44		
-13	31	29	-1	1139	-1196	-6	323	-313	-12	51	53
-14	61	58	-2	628	-686	-7	354	339	-14	47	-46
			-3	546	577	-8	24	19			
0,4,L	-4	1366	1282	-9	45	-38			0,0,L		
	-5	74	75	-10	99	100					
0	910	-925	-6	72	-62	-11	134	133	-2	1272	-1320
-1	456	-485	-7	43	41	-12	52	59	-4	834	-942
-2	101	-103	-8	138	-135	-14	42	-46	-6	352	347
-3	229	-231	-9	72	67				-8	487	-478
-4	402	-392	-10	46	-47	0,1,L			-10	154	160
-5	345	-330	-11	78	-77				-12	34	32
-6	191	176	-14	52	49	-1	294	-334			
-7	21	10				-2	183	181			

(IIIc)

Crystal data

Angular dimer of 2-(p-tert-butylphenyl) benzazete, $C_{24}H_{26}N_2$,
 $M_r=342.5$, triclinic, $a=10.185(1)$, $b=9.307(1)$, $c=10.170(1)$ Å,
 $\alpha=91.8(1)$, $\beta=94.9(1)$, $\gamma=103.2(1)^\circ$, $U=933.9$ Å³, $z=2$,
 $D_c=1.21$, $D_m=1.22$ Mg m⁻³, $F(000)=368$, space group $P\bar{1}$,
 $\mu(Mo-K\alpha)=0.77$ cm⁻¹.

[illegible]

4,-2,L	2	29	-29	6	28	-22	3	11	9	-11	30	-27	3	97	-96	-8	27	-29
10 17 -17	4	21	19	9	10	-9	4	40	-39	-10	18	-17	4	24	-19	-7	267	271
12 38 36	5,-11,L				5,-8,L		5	43	41	-9	24	28	5	29	27	-6	106	106
							6	61	68	-8	81	-86	6	37	-35	-5	114	-104
4,-1,L	-7	22	-19	-10	18	-17	8	22	-23	-6	172	176	11	29	26	-4	20	22
-14 31 29	-4	41	-38	-8	50	51	9	18	-18	-5	14	15				-2	28	20
-13 37 34	-2	34	31	-7	29	24				-3	67	69	5,-3,L			-1	157	-159
-10 22 24	-1	18	19	-5	100	-103				-2	78	77				0	147	-138
-9 30 32	0	17	-16	-4	105	-108				-1	52	-47	-12	41	40	1	291	300
-8 80 -82	3	17	-15	-3	24	-22	-11	36	33	0	118	118	-11	45	41	3	133	133
-7 45 54				-2	14	18	-9	21	18	1	96	101	-10	26	25	4	54	58
-6 175 184	5,-10,L			-1	48	-52	-7	97	101	2	58	54	-9	13	-11	6	105	103
-4 173 -170	-5	55	51	0	44	43	-6	27	-26	3	71	64	-8	70	75	7	20	14
-3 19 20	-4	52	52	1	217	222	-5	10	-10	4	16	-14	-7	15	13	8	14	-14
-2 36 35	-3	16	19	3	45	43	-4	50	49	6	26	18	-6	245	-252	9	13	-12
-1 476 -448	-2	12	-13	4	24	-24	-3	33	-40	7	30	-39	-5	67	67	11	18	-16
0 59 71	-1	23	24	5	11	14	-2	49	-56	8	28	-28	-4	38	35			
1 93 95	1	73	-78	6	19	-18	-1	51	54				-3	109	-109	5,-1,L		
2 32 31	2	17	-19	8	29	27	0	35	39	5,-4,L			-2	263	-256			
3 111 98	4	35	-33	9	20	19	1	167	-169				-1	54	-51	-11	14	-13
4 137 137	7	31	-26				2	37	-37	-11	22	-14	0	91	87	-10	27	27
5 45 39	8	25	-24				3	53	57	-10	15	13	2	69	-71	-9	55	56
6 91 85							4	10	-10	-9	22	-26	3	54	43	-8	11	-10
7 55 -54	5,-9,L						5	93	-101	-8	51	50	5	53	-42	-7	96	-95
8 90 -86							6	37	-44	-7	156	-158	7	37	37	-6	37	41
9 51 -49	-8	22	-22	-10	13	14	7	44	47	-6	49	-47	9	33	-31	-5	70	-78
10 30 30	-4	33	32	-8	16	-13	8	36	32	-5	49	50	12	15	16	-3	96	99
13 16 15	-1	57	-61	-5	60	62	9	14	10	-4	12	13				-2	499	488
	0	33	32	-3	15	-15	10	10	10	-3	11	-16	5,-2,L			-1	148	136
5,-12,L	1	65	66	-2	39	43	11	17	-13	-2	29	-32				0	348	-362
	4	29	28	-1	99	98				-1	103	98	-13	15	13	1	218	-230
-5 19 -17	5	19	20	0	243	-250	5,-5,L			0	15	21	-12	29	-27	2	50	-48
0 25 24	7	17	-16	1	219	-227				1	62	62	-10	49	-48	3	132	-147
				2	60	57	-12	46	-46	2	55	-51	-9	22	-25			

1,-2,L	0	448	464	-3	36	-36	10	21	17	2	76	-80	-8	89	-93	8	76	-81
-14	36	1	59	-2	26	24	2,-3,L			3	25	-26	-7	58	-63	9	30	32
-12	15	2	46	0	61	-65	2,-3,L			4	41	-43	-6	106	-104	11	24	23
-9	68	3	38	1	25	-28	-10	31	-28	5	18	-25	-5	40	35	2,-3,L		
-8	44	4	139	2	30	-27	-9	33	34	7	39	38	-3	24	14	2,-3,L		
-7	15	5	25	3	21	-16	-8	51	-49	8	26	27	-2	219	215	-10	39	40
-6	56	6	151	7	33	29	-7	79	-81	9	17	-16	-1	62	53	-9	15	-16
-5	209	7	89	2,-10,L			-6	42	39	10	56	-54	1	59	-55	-8	104	108
-4	147	8	64				-4	53	-51	11	11	-11	5	52	-62	-7	95	96
-3	233	9	43				-3	59	-61	2,-6,L			6	132	135	-5	42	-52
-2	42	10	56	-7	12	15	-2	20	20	-12	19	-19	8	37	33	-4	87	87
1	23	11	29	-4	28	28	-1	134	-137	-11	19	-21	9	10	-12	-3	163	-164
2	200	12	33	-3	35	30	0	92	-100	-10	19	18	10	18	18	-2	267	-268
3	72	13	15	-2	25	23	1	62	63	-10	19	23	11	14	-17	-1	110	122
4	52	14		-1	78	79	2	82	87	-9	43	-46				0	67	-62
5	43	2,-13,L		0	18	19	3	17	24	-8	67	70	2,-4,L			1	32	-32
6	10	0	20	1	22	-29	4	52	58	-7	171	171		25	26	2	45	35
7	200	2,-12,L		2	32	-31	5	53	59	-6	36	40	-11	17	-20	3	22	22
8	156			5	28	-36	7	18	-18	-5	39	42	-10	24	-26	4	23	17
9	31			8	13	-13				-3	74	72	-9	24	-26	5	57	51
10	19						2,-7,L			-2	90	-91	-8	96	-100	6	146	-142
12	15						-11	14	17	-1	56	-55	-7	90	-82	7	23	-19
1,-1,L				2,-9,L			0	114	-119	0	114	-119	-6	78	84	8	91	-93
-14	32	-28		-10	32	34	-10	23	-24	2	84	79	-5	12	-16	9	29	-31
-11	13	12		-9	33	33	-9	10	11	4	34	-30	-4	22	-22	11	21	18
-10	51	56		-8	46	-50	-8	125	123	5	18	19	-3	117	-112	2,-2,L		
-8	31	-34		-7	26	26	-7	62	-63	6	43	-46	-2	145	144			
-7	66	65		-6	21	14	-6	60	-59	7	52	-55	-1	91	94			
-6	116	-99		-4	11	-7	-5	18	-19	8	8	11	0	148	148	-12	16	20
-4	151	146		-1	57	60	-4	35	34	10	11	12	2	19	12	-8	46	-49
-3	327	-354		0	75	82	-2	51	-50	2,-5,L			3	167	-158	-6	9	0
-1	380	364		1	27	-23	-1	18	22				4	56	-48	-5	35	-33
				6	16	-14	0	48	46				6	34	33	-4	77	-65
				7	31	-27	1	12	16	-9	19	20	7	92	-97			

-13	16	16	0	157	-179	6	29	-25	0,-8,L	48	-12	25	26	-1	62	-60	11	20	-17
-10	58	-61	1	674	-686	7	36	-34		43	-10	33	-33	0	115	-95	12	51	-46
-9	45	-51	2	18	-13	0,-10,L			-9	52	-9	32	-31	1	91	171	0,-3,L		
-8	14	-17	3	268	-269	15	15	-15	-8	50	-7	76	-79	2	177	178			
-7	56	62	4	532	-501	31	31	-30	-7	21	-6	103	-105	3	106	-96			
-6	16	8	5	126	124	43	43	-47	-6	41	-5	73	-24	4	65	-53	-13	22	-19
-3	54	-58	6	108	105	33	33	-28	-5	68	-4	66	67	5	49	46	-11	32	-33
-2	52	50	7	54	54	31	31	28	-4	58	-3	73	-68	6	20	-20	-9	44	49
-1	325	-399	8	23	-25	1	16	30	-3	38	-2	73	-68	7	254	-262	-7	90	-91
0	640	-675	9	32	-35	2	29	30	0	35	-2	66	67	8	52	-51	-6	41	-40
1	51	45	10	14	-13	4	16	20	1	58	-1	155	149	9	34	41	-5	142	-138
3	461	464	11	36	33	5	13	15	4	49	0	83	82	11	21	17	-4	45	56
4	23	23	0,-12,L	22	22	6	14	-10	5	47	1	75	63	12	29	27	-3	53	51
5	81	68	-4	36	33	7	16	13	6	19	2	87	95	0,-4,L			-2	268	270
6	72	80	-2	22	22	8	19	14	10	27	3	70	-67				-1	112	-115
7	79	-70	-1	21	18	0,-9,L			0,-7,L	-23	4	21	9	-13	33	36	1	88	88
10	8	5	0	20	-22	25	25	-19	-11	29	5	48	49	-10	10	7	3	211	200
11	10	-14	1	60	-59	43	43	-45	-9	27	6	20	-19	-9	26	29	4	57	-56
12	27	25	2	37	-36	16	16	-18	-8	17	7	34	29	-8	69	69	6	60	67
			3	16	13	21	21	-24	-7	18	8	62	62	-7	76	76	7	234	231
			4	14	7	24	24	-25	-6	109				-6	74	-78	8	12	9
			0,-11,L			29	29	-29	-5	70	-12	23	-23	-5	22	-24	9	21	-20
			-6	48	42	30	30	30	-1	53	-11	31	30	-3	194	-190	10	13	-9
			-4	13	-12	26	26	-24	0	69	-10	21	23	-2	13	10	11	28	-31
			-3	31	30	30	30	-28	1	20	-9	16	-22	1	130	135	0,-2,L		
			-2	34	32	34	34	33	2	58	-8	45	-44	2	267	-275			
			0	16	14	28	28	26	3	34	-7	66	70	3	152	155	-13	27	-25
			1	28	28	14	14	13	5	34	-6	57	56	4	96	96	-9	17	-21
			2	17	18	19	19	-19	7	22	-5	44	42	5	106	-116	-7	26	30
			3	19	16	19	19	-18	8	27	-4	50	-42	6	50	52	-6	132	137
			5	32	-30				9	13	-3	41	-47	7	68	74	-5	35	29
									10	37	-2	71	-60	8	66	-69	-4	32	-34
														10	14	12	-3	42	43

-2,-1,L	3	121	123	1	24	23	5	43	45	6	64	68	-6	53	57	3	69	61
-6	182	-185	4	210	213	11	7	23	-21	7	95	97	-5	156	159	4	11	-8
-3	68	61	5	292	281	11	9	14	-12	8	15	-16	-4	29	28	5	59	-50
-2	327	-344	6	72	78	15	-1,-7,L			9	23	-23	-3	120	-122	6	58	-49
-1	642	637	7	88	-87	-18				10	22	-23	-1	191	197	7	143	-144
0	682	657	8	47	-51	-27	-8	24	20	-1,-5,L			0	105	-89	8	53	-57
1	396	-377	10	24	26		-7	31	27				1	215	-207	9	69	71
2	71	61	13	25	23	-1,-9,L	-6	48	-26	-10	14	14	2	11	-11	11	16	-15
3	83	103	14	21	21		-4	23	-53	-9	19	18	3	159	148	12	38	-38
4	131	126	-1,-12,L				-3	48	-41	-7	36	38	4	37	31	-1,-2,L		
5	27	23					-2	43	-171	-6	60	-64	5	9	7			
6	32	-38	-2	18	-20		-1	169	-171	-5	113	-114	6	43	39			
7	37	-36	-1	26	-27		0	61	-59	-4	41	-41	7	148	-150	-13	25	-25
9	17	-8	0	23	-23		1	221	220	-3	26	-25	8	106	-103	-12	12	-12
11	15	14	1	17	-12		2	152	151	-2	46	38	9	32	-38	-10	47	49
-2,0,L			3	22	22		5	33	-29	-1	117	108	10	34	30	-9	49	52
			-1,-11,L				6	30	-34	1	93	-93	12	20	20	-8	77	78
							7	44	-47	2	94	-85	13	22	22	-7	15	14
							8	15	-15	3	164	-155	-1,-3,L			-6	214	-219
-13	63	58	-4	20	21	-1,-8,L	9	15	14	4	59	-51	-13	13	14	-5	133	-138
-12	27	25	-1	32	-30		11	15	-17	5	52	49	-12	12	13	-4	115	-117
-11	18	13	0	12	8					6	47	-47	-10	25	-27	-3	42	-47
-10	29	-28	-10	26	27		-1,-6,L			7	83	79	-9	23	-23	-2	55	59
-9	27	28	-9	20	19					8	127	130	-10	25	-27	-1	352	-335
-8	77	-80	-8	44	-43								-9	23	-23	0	173	176
-7	38	-30	-7	35	-34		-11	26	-26	11	14	14	-8	44	48	1	313	323
-6	13	20	-6	35	-39		-6	53	52	12	26	21	-7	22	29	3	78	-73
-5	45	38	-5	17	-14		-5	61	63				-6	64	69	4	9	10
-4	136	126	-1,-10,L				-4	46	44	-1,-4,L			-5	46	43	5	138	132
-3	162	-168					-3	33	34				-3	122	114	7	149	141
-2	92	-99	-7	17	18		-2	27	25	-12	13	14	-2	131	-120	8	43	40
-1	695	-685	-5	20	-20		-1	44	46	-11	21	19	-1	118	113	12	16	-15
0	505	-487	-2	20	17		1	34	-28	-10	26	-24	0	448	408	13	14	-11
1	718	-719	-1	29	28		3	15	-21	-8	69	-74	1	52	-56	14	12	8
2	156	160	0	16	17		4	24	-38	-7	145	-148	2	97	95			

-3,-1,L	10	50	54	-7	51	49	-2	44	45	-2,-5,L	-2	180	183	11	26	23
0	276	-275	-6	14	11	11	0	159	160	16	-1	340	-335	12	26	22
1	220	-222	-4	37	42	25	1	18	15	43	0	124	-112	-2,-2,L		
2	154	-173	-2	24	-25	20	2	160	-162	8	1	44	-44			
3	49	47	-1	18	20	37	3	34	-34	131	2	209	202	-12	20	19
4	205	-200	0	41	-37	41	4	42	47	-6	3	27	21	-9	29	-31
5	104	-89	1	30	-29	30	5	14	-13	22	4	91	-79	-8	54	61
8	45	44	2	34	35	35	6	98	-100	41	5	20	-13	-7	85	-81
11	22	25	3	16	15	15	7	13	-13	27	6	50	43	-6	20	-17
13	19	-19	4	28	-31	31	8	33	35	34	7	9	-2	-5	36	31
			7	15	-13	12	9	16	12	114	8	16	-12	-4	112	-106
										30	9	43	49	-3	96	-102
-3,0,L	-5	16	-11	-2,-8,L	-2,-6,L					42	12	34	31	-2	195	186
-12	37	-31	-9	22	-24	-10	-10	10	13	19	-2,-3,L			-1	939	948
-10	39	42	-8	60	-57	-9	-9	14	14	43	4	40		0	17	-13
-9	106	-111	-6	15	14	-8	-8	30	33	21	5	22		1	37	-29
-8	134	-131	-5	12	-13	-7	-7	17	-16	141	6	140		2	181	-183
-7	78	75	-3	16	18	-6	-6	62	64	88	7	90		3	97	93
-6	33	36	0	20	18	-5	-5	58	59	25	-8	25	-35	4	36	37
-5	9	5	2	34	34	-3	-3	18	-21	21	-7	38	37	5	109	-92
-4	122	-119	4	20	22	2	2	69	-66	19	-6	186	183	7	18	10
-3	37	31	7	28	31	4	-2	97	-93	30	-4	108	114	8	39	-47
-2	164	-173	8	13	11	7	-1	145	-148	22	-3	241	-232	9	11	-5
-1	168	-171	10	15	10	10	0	101	98	-2,-4,L	-2	27	-31	10	17	23
0	230	242	10	15	10	10	1	104	110		-1	118	-112	11	24	-22
1	531	497	-1	39	-26	-2,-7,L	2	104	110		0	215	-224	12	29	-29
2	226	229	1	15	15		3	19	26	25	1	9	8	-2,-1,L		
3	58	68	2	27	-28	-10	4	44	-51	22	2	140	-132			
4	245	243	3	19	-18	-8	5	38	39	23	3	144	-137	-13	42	-39
5	49	-55	8	18	-14	-7	6	30	-31	69	4	133	-142	-12	26	-23
6	8	-3				-6	7	105	-106	33	5	12	-21	-10	22	21
7	96	-91	-2,-9,L	10	-11	-5	8	24	-21	11	6	57	-45	-9	43	41
8	50	-44		97	-93	-4				19	7	11	15	-8	24	-19
9	50	56	-8	45	-44	-3				17	8	22	21	-7	22	21
				47	49					123	9	18	-19			

-4,-1,L	-1	94	101	-3	35	-37	1	131	-132	-8	21	-22	2	12	10	-3,-2,L
	0	462	430	-2	34	-34	2	111	-112	-7	78	-78	3	76	-79	
-8	17	20		-1	41	-43	4	23	20	-6	55	57	4	17	16	-12
-7	52	-52		0	20	-23	5	25	-27	-5	132	129	7	54	-55	-10
-6	79	-84		1	49	48	6	83	84	-4	29	31	8	77	81	-7
-5	161	153		2	17	20	7	84	86	-3	81	-74	9	45	48	-6
-4	19	19		3	35	-32	9	16	-15	-2	101	101	10	13	-13	-5
-3	223	-220		5	44	46	11	24	23	-1	123	125	11	13	-11	-4
-2	115	-124		6	24	-23				0	150	-157	12	15	-13	-3
-1	11	12		7	25	-28	-3,-6,L			1	20	21	13	18	-15	-2
0	253	-231								2	70	70				-1
1	76	-67		-3,-8,L			-9	26	-24	3	86	84	-3,-3,L			0
2	46	-50					-8	39	-35	4	45	-43				1
3	106	-116					-7	18	19	6	41	-38	-12	12	-8	3
4	50	44					-6	50	50	7	82	-80	-11	16	-17	4
5	112	106					-5	50	-48	8	47	-49	-10	14	13	5
6	29	23					-4	108	-106	9	30	-32	-9	48	46	6
7	86	84					-3	33	-36	10	11	-10	-7	44	-47	8
8	14	12					-2	119	115	11	20	-21	-6	108	-105	9
9	101	-105					-1	104	-99				-5	82	-82	10
							0	97	-92	-3,-4,L			-4	28	-30	12
-4,0,L							1	60	59				-3	103	99	
							2	11	15	-12	15	-13	-2	86	-73	-3,-1,L
-13	29	-27		-3,-10,L			3	53	-54	-11	10	11	-1	344	-339	
-12	41	-36					4	42	40	-10	20	23	0	61	57	-11
-11	22	21					5	18	17	-9	16	16	1	27	-42	-9
-10	48	-52					6	119	-115	-8	37	40	2	99	101	-8
-9	15	14					7	12	-12	-7	70	71	3	23	-17	-7
-8	115	112					8	22	19	-6	41	-44	4	120	110	-6
-7	134	138					9	38	36	-5	83	-86	5	56	53	-5
-6	55	-49					10	26	25	-3	19	13	6	64	64	-4
-5	127	-122								-2	247	-248	7	107	111	-3
-4	143	141		-3,-9,L			-3,-5,L			-1	245	244	9	11	-10	-2
-3	128	132								0	234	238	13	16	16	-1
-2	165	-157					-10	18	-17	1	37	39				-1

[illegible]

-6,-4,L	31	30	31	30	38	-5,-9,L	6	58	-56	7	27	29	-4	53	59
6	30	46	46	30	34	-4	7	33	-36	8	43	47	-3	105	106
7	46	-20	30	34	34	-3	-5,-6,L	33	36	9	18	19	-2	15	12
8	16	-20	62	34	34	-1	21	11	20	12	12	-9	-1	152	-152
9	29	31	32	34	34	2	-9	24	-23	-5,-4,L	-5,-4,L	1	0	26	33
-6,-3,L			45	34	34	3	-7	25	-25				1	29	-23
-11	12	-12	33	34	34	6	-4	44	52				2	60	53
-10	27	12	33	34	34	-5,-8,L	-2	69	68	-11	26	-28	3	124	-118
-9	13	12	33	34	34	-6	-1	26	22	-10	19	-18	4	137	-133
-8	19	-18	34	34	34	31	0	66	68	-9	12	11	6	30	-41
-7	18	-37	34	34	34	39	1	18	-19	-8	13	-11	7	88	-84
-5	39	-39	34	34	34	37	2	62	-60	-7	33	-34	8	13	16
-4	41	-36	34	34	34	42	3	53	52	-6	49	-48	9	27	31
-3	10	-4	34	34	34	18	4	11	14	-5	78	78	12	22	18
-2	76	-79	34	34	34	191	5	31	-31	-3	28	28	13	17	-13
-1	95	-91	34	34	34	253	6	21	-20	-2	66	-56	-5,-2,L		
0	43	-46	34	34	34	49	7	12	10	-1	29	-24			
1	38	-37	34	34	34	39	9	21	-19	0	136	-141			
2	53	-58	34	34	34	73	10	24	-24	1	74	-75	-9	26	-24
3	56	-56	34	34	34	95	-5,-5,L	21	24	3	22	-21	-8	40	34
4	45	43	34	34	34	35	8	26	21	4	86	83	-7	15	15
5	53	55	34	34	34	16	-5,-7,L	41	40	5	56	59	-6	53	58
6	40	41	34	34	34	11	-8	28	5	6	58	64	-5	113	-105
7	37	36	34	34	34	19	-7	44	-47	7	28	29	-4	52	-55
9	22	-22	34	34	34	37	-6	41	-27	8	44	-50	-3	41	-42
10	24	-22	34	34	34	44	-4	60	-56	9	57	-61	-2	136	137
11	12	11	34	34	34	23	-5,-10,L	36	-98	-1	-5,-3,L		-1	92	98
-6,-2,L			13	34	34	15	-2	22	-98				0	108	99
-9	39	37	34	34	34	12	-1	33	34				1	56	39
-8	11	11	34	34	34	5	-1	26	23	-10	25	-24	2	37	44
			13	34	34	12	1	136	137	-9	27	24	3	18	16
			4	44	44	12	2	16	-17	-8	19	-19	4	56	-53
			4	44	44	12	3	43	-42	-7	53	55	5	27	-33
			5	49	49	12	4	26	29	-6	64	61	6	42	-40
			7	21	-20	12	5	47	44	-5	21	17	7	14	-10

[illegible]

-9,-6,L	7	15	18	-9,-1,L	-8,-8,L	-8,-5,L	52	-4	10	7
-4	27	34	-35	-9	-2	-8	11	-2	8	-11
-3	24			-7	0	-7	19	0	15	-13
0	29	-9,-3,L		-6	1	-6	78	1	23	-24
1	24	13	-13	-4	2	-2	21	2	41	-36
2	45	30	32	-3	5	-1	43	3	10	9
5	30	32	35	-2		1	53	4	127	129
7	18	38	-43	-1	-8,-7,L	2	64	5	68	-72
-2	49	49	-48	0	-5	3	66	6	66	-68
-1	45	35	-51	2	-4	4	23	7	36	40
1	35	71	39	3	-5	5	17	9	15	13
3	23	14	-72	4	-2	6			12	-11
4	32	32	10	5	0	8	-8,-2,L	-8,0,L		
6	45	45	-33	6	2	9	25	-9	17	15
7	45	10	-45	7	6		11	-8	22	22
8	10	8	8	8	19	-8,-4,L	29	-7	29	31
9	23	24	24	10	6	9	15	-6	30	32
-9,-2,L								-5	15	13
-9	25	25	25	-6	-7	-8	41	-4	69	-76
-8	14	15	15	-5	31	-6	47	-2	32	-30
-7	19	19	19	-4	54	-4	26	-1	28	-28
-5	13	-10	-10	-3	16	-2	52	0	49	-47
-3	20	-20	-20	-2	21	-1	41	3	105	108
-2	8	-6	-6	0	24	2	29	4	172	177
-1	19	-16	-16	1	27	3	21	5	46	40
0	46	47	47	2	50	4	59	6	112	-113
2	44	43	43	3	16	5	17	8	21	-20
3	54	-56	-56	4	12	6			33	34
4	31	-34	-34	5	14	7	-8,-1,L	-8,-1,L	126	-128
5	64	67	67	8	26	10	14	-9	34	-36
				9	15		48	-7	22	21
						-8,-3,L	36	-6	27	-26
				11		-7	39	-5	19	-18

-13,-1,L	-4	29	30	4	19	20	2	12	13	8	15	-14	-10,-3,L	4	38	36
-3 15 11	-2	16	-14	5	17	-16	4	43	-41	9	14	-13	-6 28 -26	5	14	15
-1 15 12	-1	17	-15	-11,-4,L	7	14	6	13	14	-10,-6,L	-10,-6,L	-5 18 -19	7	22	-19	
-13,0,L	0	30	27	-4	23	-23	7	14	14	-3	10	-12	0 9 -9	8	28	-27
0 9 10	2	24	-23	-11,-1,L	-4	-23	-11,-1,L	-11,-1,L	-11,-1,L	-2	16	-18	2 16 -18	9	18	17
1 16 -18	3	21	-22	-2	25	-25	-7	21	18	-2	38	-40	3 19 15	10	14	-15
2 13 -14	4	13	16	-1	22	-23	-6	30	28	0	20	-19	4 23 -22	-10,0,L		
5 20 20	5	21	24	0	17	17	-5	65	-62	1	56	-55	6 11 12			
6 22 22	6	18	16	1	43	42	-4	25	-22	3	33	32	7 21 22			
-12,-4,L	-12,0,L	-6	31	3	31	-31	-3	33	32	6	19	20	8 35 38	-7	33	-29
0 15 18	-5	20	-21	4	21	19	-2	14	-13	-10,-5,L	-10,-5,L	-10,-2,L	-10,-2,L	-6	17	-16
2 17 -20	-4	11	-10	6	19	-21	-1	33	-36	-5	16	-18	-4 16 -18	-5	24	21
-12,-3,L	-2	13	11	7	22	-25	1	17	15	-3	14	15	-3 21 -23	-4	33	33
-2 13 13	-1	44	-45	-11,-3,L	-5	21	24	2	15	-2	18	-12	-1 28 28	-3	24	-21
0 21 -23	0	21	-21	-5	14	16	2	17	-15	-3	14	15	-3 21 -23	-2	12	13
1 14 14	1	38	41	-4	20	18	4	25	-26	-2	18	-12	-1 28 28	0	48	-50
3 21 23	2	12	-9	-1	18	17	5	20	-24	0	38	37	0 15 8	1	15	-20
5 13 -17	4	13	-17	0	19	-18	6	22	-22	1	24	21	2 24 -18	3	19	-14
6 17 -16	5	23	-22	2	23	23	7	18	-20	2	19	-20	3 18 17	5	95	99
-12,-2,L	6	24	-27	3	23	-24	-11,0,L	-11,0,L	-11,0,L	3	39	-40	4 45 46	6	28	28
-1 15 15	7	13	-10	4	22	23	-7	24	-23	6	14	-15	5 55 -58	7	38	38
4 18 19	8	27	-24	5	31	35	-6	33	35	-10,-4,L	-10,-4,L	17	6 16 -18	10	15	15
-12,-1,L	-11,-5,L	-2	19	-11,-2,L	7	10	-7	24	-23	-6	19	17	7 18 -16	-9,-8,L		
-5 19 -20	-2	19	-20	0	16	-14	-6	31	21	-5	31	21	-10,-1,L	1	14	-18
	0	24	23	1	16	-14	-6	31	21	-5	31	21	-10,-1,L	1	14	-18
	1	26	-27	-6	37	31	-5	41	42	-3	31	31	-6 41 39	-9,-7,L		
	2	49	-52	-4	13	-14	-4	56	-55	-2	40	38	-5 18 17	-3	15	-15
	3	26	26	-1	23	-22	2	52	49	-1	28	-29	-4 9 -4	-2	22	-26
				1	23	-22	3	17	12	0	16	-17	-1 37 -36	-1	23	-23
				1	23	-22	4	16	16	2	31	31	0 37 43	0	15	-15
				1	23	-22	5	9	-7	4	22	-23	1 26 26			
				1	23	-22	7	18	-17				3 33 -34			

(ii) Crystal data

N-(p-chlorophenyl) iminodimethylsulphur (IV) picrate,
 $C_{14}H_{13}O_7N_4SCl$, $M_r = 416.8$, monoclinic, $a = 7.924(1)$, $b = 9.406(1)$,
 $c = 23.078(2)$ Å, $\beta = 92.19(6)^\circ$, $U = 1718.8$ Å³, $D_c = 1.61$,
 $D_m = 1.61$ Mg m⁻³, $Z = 4$, $F(000) = 856$, space group $P2_1/n$,
 $\mu(MoK_\alpha) = 3.94$ cm⁻¹.

	0,0,L	-7	414	-393	-4	226	216	0,4,L	-21	79	-81	-11	65	65	-2	303	-305
-32	52	-56	556	536	-3	141	146		-20	92	-94	-10	73	-75			
-30	64	60	-5	1097	-2	295	310	-30	-19	236	-242	-9	27	26	0,8,L		
-24	118	-121	-4	611	-1	503	497	-29	-18	93	-90	-8	23	-20			
-18	487	-497	-2	488	0	606	-640	-26	-17	59	47	-7	210	204	-25	30	-32
-16	59	55	-1	583				-25	-16	243	243	-6	168	164	-23	60	63
-10	484	485	31	26	28			-23	-15	119	-119	-5	15	20	-22	40	-41
-8	24	-21				0,3,L		-22	-14	169	-183	-4	340	-344	-19	74	-68
-6	724	706						-20	-13	460	-457	-3	227	217	-18	73	66
-4	821	-868						-19	-12	219	-216	-2	157	-159	-17	34	33
-2	576	606						-18	-11	289	287	0	337	343	-16	173	180
								-17	-10	185	185				-15	143	137
	0,1,L							-14	-9	107	-111	0,7,L			-14	99	-96
								-13	-8	182	179				-13	68	-62
-32	44	44						-12	-7	121	-116	-27	47	-41	-12	178	-175
-30	29	-28						-11	-4	199	-190	-26	58	54	-11	182	-175
-28	43	-43						-10	-3	303	-301	-25	23	22	-10	70	62
-28	68	-64						-9	-2	109	111	-23	67	70	-9	47	-47
-27	61	-59						-8	-1	172	163	-22	25	23	-8	118	-113
-26	141	142						-7				-21	42	-40	-7	198	-200
-24	82	-85						-6	0,6,L			-20	107	104	-6	223	220
-23	123	118						-5				-17	97	104	-5	141	-136
-22	71	-73						-3	-28	47	49	-16	228	-232	-4	59	64
-21	232	225						-2	-26	62	-55	-14	140	143	-3	239	237
-20	227	-224						-1	-24	186	-180	-13	118	120	-2	131	-133
-19	323	330						0	-23	75	68	-12	260	252	-1	220	224
-17	243	239							-22	64	63	-11	149	153	0	202	199
-15	144	140						0,5,L	-20	49	49	-10	25	16			
-14	132	-128							-19	23	22	-9	151	-146	0,9,L		
-13	34	-35						-30	-17	138	143	-8	54	-51		36	-33
-12	238	230						-29	-16	87	-91	-7	158	-158	-23	70	73
-11	653	665						-28	-15	146	-150	-6	164	165	-21	53	-57
-9	220	-210						-27	-14	123	-121	-5	103	100	-20	50	-48
-8	891	-868						-23	-13	98	-95	-4	233	233	-19	41	-32
								-22	-12	212	207	-3	127	-129	-18		

0,9,L	0	103	100	1,0,L	-30	51	-51	12	63	-60	-9	33	-34	31	37	-37
-17	92			-31	-27	64	-64	13	394	373	-8	466	-478			
-16	31	0,11,L		-27	-26	30	29	14	95	104	-7	764	-746	1,3,L		
-15	63	-16	73	-25	-25	156	-159	15	297	-284	-6	398	-409			
-14	103	-15	-56	-23	-24	140	-138	16	75	-79	-5	288	-284	-30	93	98
-12	48	-14	-45	-19	-23	40	40	17	337	-334	-4	641	-624	-28	48	-46
-11	64	-13	-42	-17	-22	78	-74	18	93	88	-3	255	-260	-26	41	-39
-10	74	-12	-66	-15	-21	144	-143	19	261	270	-2	420	-431	-23	129	-129
-9	163	-11	136	-13	-20	197	201	20	126	121	-1	973	-1073	-22	127	-131
-8	69	-8	29	-11	-19	280	-277	21	113	109	0	662	-692	-21	108	110
-6	36	-7	-77	-9	-17	69	-63	22	257	264	1	691	755	-20	118	-116
-5	242	-5	31	-7	-16	245	243	23	125	-125	3	155	165	-19	83	-80
-4	194	-4	-83	-5	-15	115	114	24	80	80	4	176	-174	-18	88	88
-3	28	-3	-68	-3	-13	33	-29	26	50	-52	5	483	-507	-17	134	-131
-2	60	-2	-21	-1	-12	349	-342	27	96	94	6	841	-869	-16	63	62
-1	79	-2			-11	205	-200	31	95	-93	7	392	396	-15	36	35
		0,12,L			-10	204	212				8	409	395	-13	71	60
0,10,L					-8	436	-436	1,2,L			9	222	-224	-12	468	-442
		-11	63	9	-6	187	200				10	69	72	-11	177	-177
-21	34	-7	-54	11	-5	299	-314	-31	48	-46	12	585	-572	-10	288	289
-20	35	-6	86	13	-4	751	759	-30	83	-81	13	308	302	-9	565	-533
-19	46	-4	-64	15	-3	515	-504	-29	38	-35	14	266	-265	-7	357	-343
-14	100	-3	9	17	-2	230	-231	-26	98	97	15	209	206	-6	371	-372
-13	54	-2	-72	19	-1	397	398	-25	38	39	16	80	87	-5	405	-405
-11	87	0	67	21	0	332	348	-22	228	-230	17	91	92	-4	377	384
-10	121			23	1	370	-363	-21	135	133	18	156	154	-3	236	-246
-9	72	0,13,L		25	2	240	241	-20	177	-174	19	15	8	-2	105	-104
-8	95			27	3	570	-581	-19	127	123	20	82	-78	-1	725	-751
-6	72		48	29	4	883	-924	-18	141	138	21	151	-161	0	142	-139
-5	169	-6	33	31	5	155	-163	-17	323	-320	22	114	117	1	274	-291
-4	63	-4	30		7	655	648	-15	119	127	23	97	96	2	175	166
-3	51	-3	37	1,1,L	8	339	337	-14	441	-443	24	85	81	3	49	44
-2	61		-35		9	932	-910	-12	400	391	25	59	-57	4	191	-188
-1	79				10	75	-83	-11	423	392	28	63	-56	5	120	-106
					11	60	-60	-10	301	-299	30	82	84	8	163	-169

1,3,L	-11	101	-93	26	54	56	2	678	703	-15	137	130	24	60	-64	8	141	142
	-10	93	84	27	36	39	3	184	-172	-14	134	139	25	64	69	9	17	15
9	-9	121	124	28	52	57	4	594	-619	-13	187	-193	26	96	-91	10	164	-165
10	-8	278	265	30	39	-45	5	289	-291	-12	57	-52	27	66	-62	11	143	-152
11	-7	181	-188				6	136	-122	-10	148	-148				12	321	322
12	-6	89	-86				7	441	-433	-9	344	343	1,7,L			13	109	-109
13	-4	559	-571		1,5,L		8	36	48	-8	81	-86				14	152	158
14	-3	94	-95	-30	39	-34	9	220	219	-7	381	-379	-26	58	60	15	53	56
15	-2	75	76	-29	30	-33	10	25	-34	-6	78	71	-25	39	-42	16	103	109
16	-1	564	-606	-28	45	44	11	57	54	-5	226	227	-24	28	-28	17	94	-85
17	0	265	272	-26	53	50	12	36	35	-4	526	526	-23	61	58	18	105	105
18	1	100	-98	-25	42	47	13	267	-266	-3	582	587	-22	17	-19	19	133	129
19	2	87	87	-24	34	39	14	21	-22	-2	330	337	-21	81	86	21	66	68
20	3	914	-936	-23	42	45	15	166	159	-1	233	-235	-20	124	123	22	71	73
22	4	267	240	-20	53	46	16	210	-209	0	136	137	-19	39	37	23	82	-86
23	5	97	-99	-19	209	204	17	205	213	1	99	-100	-18	79	81	24	93	-92
25	6	423	420	-18	194	-203	18	134	-135	3	74	64	-17	31	34			
30	7	708	742	-17	68	75	20	56	-57	4	104	107	-15	77	71	1,8,L		
	8	301	-280	-16	34	-40	22	33	31	5	103	105	-14	102	109			
1,4,L	9	438	-419	-15	137	-131	23	31	35	6	124	-115	-13	49	-59	-25	82	-82
-30	10	553	-547	-14	219	211	25	71	63	7	163	166	-12	21	-20	-24	66	62
-28	11	191	-167	-13	40	35	26	39	-37	8	84	-88	-9	251	254	-23	45	-48
-27	12	34	32	-12	99	-101	27	45	-42	9	146	-149	-8	76	-74	-22	80	-79
-26	13	64	54	-11	231	231	28	49	50	10	181	182	-7	236	237	-21	42	40
-25	14	117	115	-10	70	72	29	37	-36	11	171	171	-6	223	-226	-18	78	75
-22	16	124	-117	-9	175	158				12	92	97	-4	50	48	-17	127	-122
-21	17	156	154	-8	53	62				14	109	108	-3	132	-124	-15	152	147
-20	18	310	-311	-7	125	-116				15	233	-231	-2	342	-352	-12	33	-39
-19	19	140	-134	-6	43	52	-27	101	-95	16	70	-71	-1	275	282	-11	122	-122
-18	20	59	-70	-5	78	78	-26	71	71	17	119	113	0	41	-32	-10	16	-17
-17	21	42	48	-4	276	273	-22	49	-48	18	31	-34	2	277	278	-9	93	93
-16	22	150	-147	-3	136	129	-21	111	-109	19	38	39	3	322	-329	-8	252	-258
-15	23	44	50	-2	354	-359	-19	130	-126	20	57	-55	4	173	-181	-7	73	72
-12	24	80	-75	-1	278	-288	-18	206	-211	21	114	-112	6	135	130	-5	106	103
439	25	18	-21	1	382	-376	-17	64	68	22	21	-21	7	125	120			

1,8,L	1,9,L	1,10,L	1,11,L	1,12,L	2,0,L	2,1,L	2,2,L	
-4 156 155	-23 51 -54	-13 125 -126	-17 47 -42	-13 46 -48	-30 83 -78	-32 77 77	6 282 266	
-3 92 91	-19 34 29	-12 190 -188	-15 56 -54	-11 39 35	-28 174 -171	-31 27 26	7 141 120	
-2 292 -289	-17 84 -86	-10 197 194	-14 97 90	-9 68 71	-24 155 -152	-29 49 55	8 153 -146	
1 387 393	-16 45 45	-9 108 112	-11 66 62	-7 139 -134	-22 130 127	-28 56 -58	9 317 305	
2 243 251	-15 63 -59	-8 103 -105	-10 39 31	-5 58 -58	-20 35 35	-25 16 -19	10 401 -376	
3 49 53	-14 177 -176	-7 53 -55	-12 48 48	-3 72 75	-18 318 -317	-23 86 -80	11 295 -289	
4 94 103	-13 176 121	-6 211 -211	-14 97 90	-1 60 -62	-16 332 -324	-22 179 -181	12 170 -156	
5 257 -269	-12 123 123	-5 76 73	-15 56 -54	1,12,L	-14 111 116	-21 124 -127	13 281 279	
6 75 -78	-11 87 87	-4 27 -28	-17 47 -42	-13 46 -48	-12 231 222	-20 484 -486	14 379 -369	
7 170 172	-10 88 88	0 50 47	-18 46 46	-11 39 35	-10 485 -479	-19 18 23	15 155 -158	
8 86 -94	-14 177 -176	1 58 55	-19 59 57	-9 68 71	-18 318 -317	-23 86 -80	16 113 -111	
9 60 -64	-13 176 121	2 31 33	-20 60 60	-7 139 -134	-16 332 -324	-22 179 -181	17 38 36	
10 210 216	-12 123 123	4 102 95	-17 47 -42	-5 58 -58	-14 111 116	-21 124 -127	18 255 263	
11 202 -203	-11 87 87	5 189 186	-18 46 46	-3 72 75	-12 231 222	-20 484 -486	19 220 -227	
12 98 110	-10 88 88	6 90 93	-19 59 57	-1 60 -62	-10 485 -479	-19 18 23	20 220 -227	
13 49 52	-9 108 112	8 67 -73	-20 60 60	-13 46 -48	-8 96 89	-23 86 -80	21 145 -145	
14 58 54	-8 103 -105	12 105 101	-21 60 64	-11 39 35	-6 547 521	-22 179 -181	22 69 -63	
15 32 -34	-7 108 112	13 58 -64	-22 71 -74	-9 68 71	-4 1124 -1152	-21 124 -127	23 98 -103	
16 104 107	-6 211 -211	14 82 -85	-23 45 -44	-7 139 -134	0 307 291	-20 484 -486	24 134 136	
18 63 -72	-5 76 73	18 163 166	-24 48 48	-5 58 -58	2 286 293	-18 186 186	25 69 69	
19 36 -37	-4 27 -28	20 36 -35	-25 57 57	-3 72 75	4 614 597	-17 30 -32	26 35 -31	
23 129 130	-3 49 53	21 60 64	-26 65 65	-1 60 -62	6 1618 -1759	-15 163 -152	29 44 -45	
24 38 39	-2 243 251	22 71 -74	-27 89 87	-1 60 -62	8 282 282	-8 38 -43	31 52 -53	
25 36 -38	-1 387 393	23 45 -44	-28 61 61	1,13,L	10 406 -400	-7 534 -548		
	2 243 251				12 725 -716	-6 52 49		
	3 49 53				16 98 107	-5 1380 -1450		
	4 94 103				18 49 -46	-4 337 324		
	5 257 -269				20 79 70	-3 1133 1167		
	6 75 -78				22 215 217	-2 1380 1462		
	7 170 172				24 163 173	-1 874 880		
	8 86 -94				26 206 -212	0 1118 -1344		
	9 60 -64				28 48 47	1 849 -854		
	10 210 216				30 126 121	2 387 -379		
	11 202 -203					3 251 233		
	12 98 110					4 410 394		
	13 49 52					5 307 -299		
	14 58 54							
	15 32 -34							
	16 104 107							
	18 63 -72							
	19 36 -37							
	23 129 130							
	24 38 39							
	25 36 -38							

2,2•L	17	221	234	-4	250	241	-26	81	75	13	254	-252	-4	90	-94	-21	59	-60
-21	257	259		-3	47	58	-25	81	84	14	288	298	-3	300	311	-20	61	64
-20	23	-27		-2	166	168	-24	103	102	15	318	-328	-2	102	108	-19	27	-27
-19	13	11		-1	342	-335	-23	56	57	16	399	-404	-1	60	50	-18	127	125
-18	238	242		0	505	513	-21	71	-69	17	126	130	0	197	210	-16	307	-312
-16	81	82		1	205	202	-20	22	23	18	79	-81	1	54	-65	-15	132	-125
-15	231	224		3	481	507	-19	147	158	19	100	100	2	117	-112	-14	93	103
-14	90	83		4	47	-39	-18	67	66	20	208	214	3	63	-52	-13	73	-78
-13	328	319		5	688	-689	-17	44	38	21	94	-101	4	400	-401	-12	140	138
-12	125	-137		6	318	319	-16	22	-14	22	128	-127	6	65	-65	-11	29	27
-11	527	-513		7	76	68	-15	152	-154	24	52	50	7	84	-79	-10	190	-193
-10	194	-193		8	21	-19	-13	60	-55	27	69	-67	8	41	44	-9	209	211
-9	168	-155		9	415	415	-12	268	-265	29	47	-44	9	33	30	-8	37	33
-8	624	604		10	136	-128	-11	242	240	2,5•L			10	176	-176	-7	156	158
-7	127	118		11	307	-298	-10	164	160				11	196	-200	-6	52	-47
-6	116	-121		12	316	-320	-9	60	53				12	381	386	-5	64	-62
-5	429	-444		13	46	-47	-8	572	599	-29	37	40			122	-4	238	233
-4	14	10		14	48	-50	-7	285	-290	-27	58	-59			97	-3	111	108
-3	858	-866		15	277	278	-6	236	-240	-24	44	-42			-151	-2	160	159
-2	579	-566		17	138	-131	-5	145	-139	-23	140	138			69	-1	253	252
1	261	-263		18	472	-482	-4	135	-134	-22	42	42			76	0	62	-62
2	332	333		19	370	-366	-3	44	-42	-20	92	97			167	1	67	66
3	74	67		20	170	-172	-2	341	336	-19	38	-45			93	2	441	456
4	150	-145		21	107	-113	0	307	-312	-17	35	-42			61	4	46	45
5	206	-199		22	135	140	1	285	271	-15	77	80			99	5	185	189
6	41	-27		23	53	53	2	226	-216	-14	197	195			104	6	109	-116
7	300	292		26	48	45	3	327	334	-13	173	166			100	7	49	34
8	160	-145		27	84	-82	4	383	375	-12	66	59			77	8	451	456
9	88	-94		30	80	77	5	80	-79	-11	185	186			52	10	308	317
10	319	-313		2,4•L			6	197	-188	-10	195	-197			60	11	247	-249
11	196	-200					7	125	-126	-9	251	260		2,6•L		12	64	-62
13	92	94			53	52	8	191	193	-8	219	223				13	149	153
14	113	106		-30	48	-45	9	35	32	-7	294	287				15	287	286
16	244	-242		-29	35	-30	11	597	624	-6	330	328				16	99	99
				-27	35	-30	12	71	72	-5	80	-73						

[illegible]

3,0,L	-6	180	168	-28	39	34	13	375	-358	-3	102	101	-26	39	-40	10	108	-108
7	-5	225	-230	-27	48	-44	14	230	-228	-2	138	143	-24	55	-49	11	235	234
9	-4	460	-465	-24	100	100	17	38	37	-1	296	273	-23	46	46	12	316	-316
11	-3	358	-350	-23	78	-78	18	265	265	0	69	-57	-22	52	53	13	351	-346
13	-2	273	-260	-22	59	59	19	148	-157	1	843	924	-21	56	-61	14	122	118
17	-1	320	302	-21	38	36	20	199	213	2	657	-688	-20	140	146	15	71	70
17	0	156	141	-19	261	256	21	115	-118	3	111	105	-19	71	-80	16	143	143
19	1	748	736	-18	269	275	23	50	53	4	487	483	-18	41	-36	17	25	-24
21	2	239	227	-17	46	47	24	100	102	5	79	87	-17	119	121	18	151	-152
23	3	35	-40	-16	146	151	25	36	42	6	244	236	-16	48	-60	19	142	-140
27	4	396	397	-15	312	-320	26	88	89	7	344	327	-15	92	-81	21	20	21
29	5	132	-124	-14	54	52	28	128	-123	8	249	-246	-14	174	179	22	125	125
	6	328	-311	-13	37	47	29	49	-50	9	127	125	-13	182	-176	23	85	-85
3,1,L	7	279	277	-12	165	173				10	75	-78	-12	25	26	25	34	-31
	8	334	-316	-11	498	483		3,3,L		12	69	61	-11	62	59	26	55	-55
-28	9	276	-254	-10	102	111				14	301	298	-10	36	31	27	47	43
-26	10	369	358	-9	229	-224	-30	52	50	15	162	-161	-9	42	34	28	39	40
-25	12	22	-26	-8	161	147	-29	39	38	16	104	102	-8	141	143			
-24	13	191	-179	-7	191	196	-28	67	72	17	95	-99	-7	183	180	3,5,L		
-23	15	68	72	-6	396	-407	-27	64	64	18	234	-232	-6	515	526		28	25
-21	16	195	200	-3	147	-133	-26	56	-48	19	147	-152	-5	255	245	-29	44	42
-20	17	143	-135	-2	357	-358	-25	56	54	20	137	134	-4	144	135	-26	44	42
-19	19	166	-156	-1	163	169	-22	179	185	21	42	-42	-3	42	-45	-25	43	49
-18	21	101	-111	0	737	-739	-20	42	42	22	59	-60	-2	21	-24	-24	67	68
-17	22	95	97	1	31	29	-19	76	-74	23	51	-52	-1	467	460	-23	117	118
-16	23	38	35	2	563	-561	-18	94	-89	24	102	-98	0	75	82	-22	59	-55
-15	25	95	-95	4	240	243	-14	251	245	26	42	42	1	148	-154	-21	37	-39
-14	27	37	39	5	119	113	-13	119	111	27	42	38	2	167	154	-19	53	-46
-13	28	62	-66	6	97	83	-12	119	-112	28	35	31	3	151	-130	-17	149	157
-12	29	90	86	7	464	-454	-10	39	42	29	52	50	4	30	-38	-16	124	-130
-11				8	244	-246	-9	34	17	30	66	-65	5	177	181	-15	57	57
-10		3,2,L		9	360	356	-8	383	383				6	385	382	-14	80	-86
-9				10	199	194	-7	114	-111	3,4,L			7	272	-276	-13	101	-101
-8	-30	46	50	11	151	141	-6	61	62				8	202	205	-12	434	438
-7	-29	48	-44	12	303	295	-4	551	-554	-29	25	20	9	522	524			

[illegible]

3,11,L	4,0,L	-14	160	162	25	108	-108	3	98	89	-15	84	-81	25	40	39
-6	-22	182	184	162	26	97	97	4	263	-261	-14	33	31	26	34	37
-5	-20	164	-159	190	27	78	79	5	62	56	-13	253	-253	27	46	-43
-4	-18	69	69	72	28	34	-31	7	163	168	-12	46	53			
-1	-16	198	201	218	29	100	95	8	156	-152	-11	471	478	4,4,L		
0	-14	165	-167	232				9	103	102	-10	146	144		60	-58
1	-12	140	-135	411	10	208	199	10	208	199	-9	230	234	-25	23	-26
2	-10	85	91	122	11	127	-134	11	127	-134	-8	66	61	-24	96	-100
3	-8	618	-624	184	12	191	181	12	191	181	-7	282	-283	-20	110	-110
5	-6	202	-198	79	14	73	-73	14	73	-73	-5	206	208	-19	122	-121
6	-4	386	370	138	15	92	91	15	92	91	-4	566	-555	-18	53	54
7	-2	88	-76	265	16	132	133	16	132	133	-3	470	-459	-15	30	-28
9	0	286	-276	90	17	76	-80	17	76	-80	-2	446	-448	-14	250	-254
10	2	275	267	446	18	115	-116	18	115	-116	-1	124	-112	-13	73	73
11	4	60	57	400	19	117	-115	19	117	-115	0	587	583	-12	35	-40
14	6	117	111	87	20	107	-111	20	107	-111	1	336	323	-11	63	67
15	10	138	137	249	21	40	48	21	40	48	2	59	-60	-10	85	89
3,12,L	12	99	90	308	22	93	93	22	93	93	4	89	81	-9	48	-46
	14	285	-275	272	23	91	93	23	91	93	5	128	-122	-8	27	-30
	16	493	516	184	24	70	-76	24	70	-76	6	140	-143	-7	293	293
-9	18	264	269	324	27	52	-55	27	52	-55	7	139	-142	-6	119	-122
-8	20	160	-162	491	28	40	-40	28	40	-40	8	31	29	-5	107	106
-7	24	182	188	139	29	16	18	29	16	18	9	76	76	-4	466	466
-6	26	51	53	78				4,3,L			11	629	641	-3	262	243
-5	28	47	-48	41	-9	252	-249				12	349	-354	-2	527	528
-4				57	-8	144	-145	-25	60	61	13	174	-176	-1	287	287
-3				105	-7	361	-355	-24	66	65	14	162	161	0	124	-128
-1				120	-6	144	147	-23	65	70	15	187	-192	1	183	-178
1	-26	93	-92	29	-5	654	649	-22	85	88	16	53	50	2	73	-67
4	-24	103	105	27	-4	243	242	-21	58	61	17	264	263	3	26	-25
5	-23	44	-51	178	-3	162	-166	-19	52	60	18	97	-99	4	291	287
6	-20	282	-280	105	-2	462	-457	-18	106	-112	21	78	-75	5	180	172
8	-16	257	256	21	-1	810	-846	-17	113	118	22	109	-106	6		
9	-15	70	75	72	2	38	-50	-16	51	51	23	86	82			
				-75							24	70	70			

4,4,L	7	71	-66	-14	28	26	4,6,L	17	45	46	8	83	-84	2	118	-118	5	78	82
	8	93	-95	-12	120	-126	-26	18	54	52	9	99	-95	3	119	122	6	86	-90
	9	75	74	-11	43	-49	-25	19	50	-52	10	119	-126	4	239	-245	7	83	-86
	10	368	-368	-8	230	-234	-22	20	145	-146	11	48	51	5	169	-174	9	94	-90
	11	289	288	-7	293	300	-20	22	40	-35	12	95	97	6	44	41	10	39	-40
	12	349	351	-6	216	-216	-19	24	90	90	13	50	-47	8	127	-136	11	186	186
	13	89	-91	-5	154	153	-17	25	28	28	14	135	135	9	122	121	12	80	-85
	14	230	227	-3	350	-355	-16				15	77	-79	10	106	-104	14	62	-57
	15	303	-298	-2	100	-99	-14	4,7,L			16	98	-94	11	124	-124	15	73	-73
	16	280	-277	-1	58	-51	-13	-19	51	-53	17	98	-98	13	42	-43	16	54	-58
	17	275	-277	0	156	-159	-11	-18	73	-74	18	76	72	14	74	-73	17	62	66
	18	168	-173	1	34	41	-10	-17	60	-63	19	50	-49	15	91	90			
	19	145	146	2	128	129	-9	-16	65	66	20	34	36	16	49	50			
	20	43	-42	3	438	-446	-8	-15	12	9	21	49	51	17	75	-78			
	21	51	52	4	175	-177	-7	-14	28	-27	22	93	-94	19	58	-55	-12	35	38
	22	52	49	5	45	48	-6	-13	110	-110	23	84	-85	21	31	34	-11	42	39
	23	63	-65	6	148	-147	-5	-12	78	-80				22	133	134	-10	43	45
	24	42	-44	7	142	143	-4	-11	48	-41							-9	78	80
	26	36	-36	8	112	107	-3	-9	52	-50					4,9,L		-8	44	43
	28	100	101	10	107	109	-2	-8	83	-83	-23	45	47		92	-95	-7	46	-44
4,5,L				11	171	-167	-1	-7	189	-195	-22	80	78	-21	13	15	-6	141	141
	-27	33	37	12	100	99	0	-6	71	-78	-18	64	-57	-19	63	62	-5	77	-72
	-26	65	64	13	196	-199	1	-5	28	-26	-17	72	74	-17	102	-98	-4	35	37
	-25	47	-43	14	65	68	2	-4	97	101	-16	95	96	-15	110	-109	-2	122	-120
	-21	88	91	15	45	-38	3	-3	184	-190	-13	25	-27	-13	83	84	0	124	122
	-20	94	98	16	310	311	4	-2	195	196	-12	19	-21	-12	55	49	1	70	-69
	-19	54	-60	17	212	211	5	0	105	-104	-9	96	-99	-10	129	-130	2	61	56
	-18	47	54	18	139	137	8	1	155	145	-7	41	39	-7	49	52	4	67	-66
	-17	21	-22	21	37	-38	10	2	94	-96	-5	91	86	-5	74	73	5	79	70
	-16	157	-163	22	57	59	11	3	128	-132	-4	155	-161	-3	41	41	6	101	101
			40	25	76	-77	13	4	163	170	-3	99	-99	-2	54	-64	8	54	-53
			38	26	28	-26	14	5	49	46	-2	166	-166	-1	48	44	9	10	-15
			38	27	50	53	15	6	120	125	-1	117	-124	0	73	76	10	59	-62
			203				16	7	88	93	0	166	174	1	85	82	11	65	65
											1	63	62	3					

4,10,L	4	87	85	-28	32	-39	15	79	77	-1	276	-273	-18	37	-32	21	82	83
	5	59	56	-27	56	-53	16	171	-169	0	282	278	-17	104	-107	22	36	41
	6	104	101	-26	48	-52	17	98	102	1	130	121	-16	93	-96	23	35	36
				-23	73	-77	18	30	30	2	520	-500	-14	135	138	25	47	-43
	5,0,L			-22	35	-39	19	102	-104	3	269	253	-13	115	110	26	47	-50
				-20	43	-42	20	137	-140	4	48	-39	-12	83	-83			
				-19	126	128	21	144	-149	5	110	-101	-10	148	-150	5,4,L		
				-18	81	-83	22	92	-90	6	118	120	-8	93	-93			
4,11,L				-17	78	-71	23	101	102	7	150	-148	-7	93	97	-26	47	41
				-16	51	-52	24	78	81	8	95	90	-6	114	115	-23	31	33
				-13	76	-68	25	24	-21	9	30	20	-5	101	96	-22	104	-104
-14	69	65		-12	100	-100	26	40	40	10	96	90	-4	147	146	-21	88	-90
-13	42	42		-11	361	357	27	32	-29	11	90	86	-3	159	-157	-20	84	-83
-5	31	34		-10	128	124	28	31	-28	12	107	105	-2	206	-212	-19	160	-161
-4	32	-29		-9	225	213				13	139	137	-1	128	-125	-15	58	59
-1	56	59		-8	30	31				15	147	-149	0	164	-160	-14	141	-149
	46	43		-7	42	-45				16	141	-144	1	160	-161	-13	66	-60
	40	-39		-6	251	-259	-29	47	-44	17	55	56	2	251	245	-12	36	-37
3	126	-130		-5	174	172	-28	62	63	18	117	-120	3	53	-53	-11	114	115
4	80	-82		-4	397	393	-25	49	48	19	26	25	4	375	-383	-10	152	-152
5	36	32		-3	113	-105	-21	48	46	20	41	38	5	46	49	-9	327	329
6	60	-60		-2	238	232	-17	29	26	21	80	-78	6	203	194	-8	386	-400
7	93	94		-1	631	-629	-16	62	63	22	86	-85	7	105	-106	-6	26	-26
8	99	98		0	65	55	-15	101	99	24	42	-46	8	639	645	-5	132	132
10	47	42		2	86	84	-14	46	45	25	27	23	9	174	-177	-4	117	118
11	44	44		3	399	391	-12	152	-153	26	57	58	10	105	-106	-3	424	421
12	145	-142		4	49	35	-11	66	54	27	37	-34	11	255	-256	-1	73	75
13	45	43		5	97	-94	-9	176	182				12	27	-26	2	106	106
				6	174	167	-8	77	73	5,3,L			13	124	-122	3	164	159
				7	410	-402	-7	210	-209				14	286	283	5	57	-61
-6	0	-2		8	149	-141	-6	294	-288	-23	32	36	15	131	-136	6	173	-175
-4	79	83		9	59	63	-5	207	-201	-22	75	73	16	86	85	7	79	81
0	65	-62		10	235	-228	-4	489	-488	-21	76	76	17	70	-68	8	167	167
1	26	-25		13	200	-203	-3	142	139	-20	154	158	18	33	-35	9	242	-245
3	61	57		14	201	-202	-2	239	230	-19	79	-88	20	27				

5,4,L	3	138	-139	-3	194	-195	-6	92	-91	-2	118	118	4	173	-172	12	28	-31
	4	65	-68	-2	89	-87	-4	61	60	-1	97	-100	5	50	46	14	41	-44
	5	156	158	-1	130	-132	-3	49	39	2	66	-68	6	31	-35			
	6	146	-142	0	48	52	-1	48	-49	3	57	58	7	26	20	5,11,L		
	7	32	-30	1	267	273	0	105	-108	4	47	51	8	84	88			
	8	165	160	3	59	71	1	152	162	5	33	-33	9	49	50	-10	41	38
	9	255	-256	4	213	-220	2	74	-85	6	41	45	10	122	-121	-7	53	52
	10	55	-53	5	306	-303	3	145	160	7	65	-61	12	44	-43	-6	73	-66
	11	24	-22	6	79	-60	6	136	140	8	105	-105	13	62	-61	-3	78	-75
	12	191	188	7	166	163	7	19	-18	9	64	-67	14	108	108	-1	54	-55
	13	85	85	8	82	-78	8	13	-16	10	53	-48	15	23	-23	0	25	-28
	14	48	48	9	44	45	9	99	99	13	59	53	16	38	33	2	72	73
	15	112	-111	11	138	-139	10	146	-149	15	116	-119	17	27	-24	5	50	44
	16	85	-87	12	179	176	13	142	-143	18	27	27	18	26	-27	6	18	-18
	17	205	209	13	125	128	14	73	-83	19	87	86				9	91	-89
	18	145	147	15	18	11	15	113	112	20	64	67	5,10,L					
	19	56	-57	17	19	-17	16	87	-84									
	20	78	77	18	36	-32	17	100	99	5,9,L						6,0,L		
	21	130	-126	20	60	55	18	57	58									
	22	81	78	21	54	-52	19	160	-165	-19	46	-49	-13	52	-48			
	23	30	31	22	76	78	21	30	-29	-18	88	-85	-12	81	79	-26	69	-75
	24			23	54	56	22	85	-88	-16	70	-64	-11	36	-35	-24	36	37
	25			24	45	-44				-15	94	95	-10	26	30	-22	89	89
5,0,L										-14	76	75	-9	59	61	-20	83	-84
										-12	49	52	-5	54	57	-14	23	18
										-9	19	19	-4	72	78	-12	66	-65
										-8	49	-44	-3	133	133	-10	103	-105
										-6	51	-50	-1	53	-53	-6	79	-78
										-5	59	54	2	31	28	-4	140	-143
										-3	74	72	3	51	52	-2	30	36
										-2	35	-37	4	26	24	0	507	-488
										-1	64	61	5	33	-31	2	236	-230
										0	38	36	7	80	82	4	215	215
										-1	44	-45	8	45	51	8	309	-301
										1	44	-45	9	25	25	10	194	-191
										2	104	100	10	115	116	12	67	63
													11	33	-28			

6,0,0,L	8	153	149	-4	54	-49	-13	47	-48	6,4,4,L	14	78	81	6	49	-43
	9	115	108	-3	72	70	-11	106	-107		15	70	70	7	39	-43
14	34	-36		-2	36	-36	-10	85	-81	-22	70	43	42	8	69	-69
16	158	-158	61	-1	89	-85	-9	58	-62	-20	76	81	-83	9	183	186
18	219	223	128	0	63	56	-8	173	172	-19	114	55	-57	10	198	200
20	161	163	191	3	295	289	-6	237	233	-18	48	17	-15	11	41	-44
22	158	-160	70	4	107	102	-5	357	-360	-17	50	49	48	12	37	-38
26	148	148	194	6	272	-272	-4	198	-191	-16	156	155		14	269	-269
			111	7	214	-208	-2	65	60	-15	78	80		15	85	86
			110	8	235	235	-1	188	188	-14	49	-51		16	56	53
			94	9	85	-79	0	29	31	-13	90	93		17	74	74
			-1	10	197	195	1	205	-214	-12	121	123		18	95	100
-26	53	-49		11	277	273	2	53	-51	-11	49	-50		19	25	-22
-25	39	42	81	12	446	-446	3	77	74	-10	89	93		20	32	-39
-23	45	-45	86	13	66	62	4	155	156	-9	126	-130		21	48	47
-21	103	-106		15	194	-196	5	97	94	-8	326	327		22	59	-59
-19	46	40		16	28	23	6	32	33	-6	75	-72				
-17	52	51		17	66	63	7	207	-211	-5	137	-137		6,6,L		
-16	24	23	83	18	88	-85	8	212	211	-4	58	-64				
-14	114	115	-60	19	35	-34	9	74	72	-3	60	45			50	54
-12	47	51	-60	20	29	28	10	129	-130	-2	401	406		-18	21	20
-11	97	-92	-72	21	132	-135	11	464	463	-1	145	149		-17	35	-34
-10	44	-46	106	22	37	-40	12	153	-151	1	43	41		-16	66	68
-9	62	-67	67	23	53	52	13	240	242	2	65	57		-15	36	34
-8	101	96	-50	24	36	40	15	95	-95	3	162	-157		-13	82	84
-6	112	112	101	25	46	-43	16	28	-28	4	41	-44		-12	49	-48
-5	115	-112	-114	26			17	103	-103	5	61	-60		-11	41	-42
-4	118	-118	15				19	191	195	6	39	-44		-10	47	41
-2	158	-155	61				20	51	-50	7	109	109		-9	27	-25
0	187	190	100				21	35	32	8	196	190		-8	58	59
1	118	-120	265	-23	82	86	23	61	-64	9	28	-31		-7	47	-49
3	103	105	-51	-22	97	99	24	46	47	10	161	-162		-6	141	-141
4	254	-253	114	-21	48	52	25	72	76	11	152	-150		-5	71	-69
5	168	-167	110	-20	54	48				12	101	-10				

6,6,L	6,7,L	6,8,L	6,9,L	6,10,L	6,11,L	7,1,L	7,2,L	7,3,L	7,4,L	7,5,L	7,6,L	7,7,L	7,8,L	7,9,L	7,10,L	7,11,L	7,12,L	7,13,L	7,14,L	7,15,L	7,16,L	7,17,L	7,18,L	7,19,L	7,20,L	7,21,L	7,22,L	7,23,L	7,24,L	7,25,L	7,26,L	7,27,L	7,28,L	7,29,L	7,30,L	7,31,L	7,32,L	7,33,L	7,34,L	7,35,L	7,36,L	7,37,L	7,38,L	7,39,L	7,40,L	7,41,L	7,42,L	7,43,L	7,44,L	7,45,L	7,46,L	7,47,L	7,48,L	7,49,L	7,50,L	7,51,L	7,52,L	7,53,L	7,54,L	7,55,L	7,56,L	7,57,L	7,58,L	7,59,L	7,60,L	7,61,L	7,62,L	7,63,L	7,64,L	7,65,L	7,66,L	7,67,L	7,68,L	7,69,L	7,70,L	7,71,L	7,72,L	7,73,L	7,74,L	7,75,L	7,76,L	7,77,L	7,78,L	7,79,L	7,80,L	7,81,L	7,82,L	7,83,L	7,84,L	7,85,L	7,86,L	7,87,L	7,88,L	7,89,L	7,90,L	7,91,L	7,92,L	7,93,L	7,94,L	7,95,L	7,96,L	7,97,L	7,98,L	7,99,L	7,100,L	7,101,L	7,102,L	7,103,L	7,104,L	7,105,L	7,106,L	7,107,L	7,108,L	7,109,L	7,110,L	7,111,L	7,112,L	7,113,L	7,114,L	7,115,L	7,116,L	7,117,L	7,118,L	7,119,L	7,120,L	7,121,L	7,122,L	7,123,L	7,124,L	7,125,L	7,126,L	7,127,L	7,128,L	7,129,L	7,130,L	7,131,L	7,132,L	7,133,L	7,134,L	7,135,L	7,136,L	7,137,L	7,138,L	7,139,L	7,140,L	7,141,L	7,142,L	7,143,L	7,144,L	7,145,L	7,146,L	7,147,L	7,148,L	7,149,L	7,150,L	7,151,L	7,152,L	7,153,L	7,154,L	7,155,L	7,156,L	7,157,L	7,158,L	7,159,L	7,160,L	7,161,L	7,162,L	7,163,L	7,164,L	7,165,L	7,166,L	7,167,L	7,168,L	7,169,L	7,170,L	7,171,L	7,172,L	7,173,L	7,174,L	7,175,L	7,176,L	7,177,L	7,178,L	7,179,L	7,180,L	7,181,L	7,182,L	7,183,L	7,184,L	7,185,L	7,186,L	7,187,L	7,188,L	7,189,L	7,190,L	7,191,L	7,192,L	7,193,L	7,194,L	7,195,L	7,196,L	7,197,L	7,198,L	7,199,L	7,200,L	7,201,L	7,202,L	7,203,L	7,204,L	7,205,L	7,206,L	7,207,L	7,208,L	7,209,L	7,210,L	7,211,L	7,212,L	7,213,L	7,214,L	7,215,L	7,216,L	7,217,L	7,218,L	7,219,L	7,220,L	7,221,L	7,222,L	7,223,L	7,224,L	7,225,L	7,226,L	7,227,L	7,228,L	7,229,L	7,230,L	7,231,L	7,232,L	7,233,L	7,234,L	7,235,L	7,236,L	7,237,L	7,238,L	7,239,L	7,240,L	7,241,L	7,242,L	7,243,L	7,244,L	7,245,L	7,246,L	7,247,L	7,248,L	7,249,L	7,250,L	7,251,L	7,252,L	7,253,L	7,254,L	7,255,L	7,256,L	7,257,L	7,258,L	7,259,L	7,260,L	7,261,L	7,262,L	7,263,L	7,264,L	7,265,L	7,266,L	7,267,L	7,268,L	7,269,L	7,270,L	7,271,L	7,272,L	7,273,L	7,274,L	7,275,L	7,276,L	7,277,L	7,278,L	7,279,L	7,280,L	7,281,L	7,282,L	7,283,L	7,284,L	7,285,L	7,286,L	7,287,L	7,288,L	7,289,L	7,290,L	7,291,L	7,292,L	7,293,L	7,294,L	7,295,L	7,296,L	7,297,L	7,298,L	7,299,L	7,300,L	7,301,L	7,302,L	7,303,L	7,304,L	7,305,L	7,306,L	7,307,L	7,308,L	7,309,L	7,310,L	7,311,L	7,312,L	7,313,L	7,314,L	7,315,L	7,316,L	7,317,L	7,318,L	7,319,L	7,320,L	7,321,L	7,322,L	7,323,L	7,324,L	7,325,L	7,326,L	7,327,L	7,328,L	7,329,L	7,330,L	7,331,L	7,332,L	7,333,L	7,334,L	7,335,L	7,336,L	7,337,L	7,338,L	7,339,L	7,340,L	7,341,L	7,342,L	7,343,L	7,344,L	7,345,L	7,346,L	7,347,L	7,348,L	7,349,L	7,350,L	7,351,L	7,352,L	7,353,L	7,354,L	7,355,L	7,356,L	7,357,L	7,358,L	7,359,L	7,360,L	7,361,L	7,362,L	7,363,L	7,364,L	7,365,L	7,366,L	7,367,L	7,368,L	7,369,L	7,370,L	7,371,L	7,372,L	7,373,L	7,374,L	7,375,L	7,376,L	7
-------	-------	-------	-------	--------	--------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---

-21	-18	-16	-15	-14	-12	-11	-10	-9	-8	-6	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	9	10	12	13	14	16	18	20	21	22	23										
45	63	58	49	50	54	135	110	24	302	62	71	154	83	30	31	73	64	104	202	194	174	20	54	123	159	28	102	105	261	105	247	133	46	47	168	40	46	75	73				
47	58	-54	50	-54	135	-83	-103	21	-312	61	77	149	-86	31	-73	-42	-40	-47	-29	-59	261	105	-134	49	-48	176	45	43	75	72	72	72	45	43	43	43	36	36	36	36			
65	84	88	90	61	50	49	44	69	139	77	31	145	66	72	70	73	64	104	202	194	174	20	54	123	159	28	102	105	261	105	247	133	46	47	168	40	46	75	73				
-24	-20	-19	-14	-13	-11	-10	-9	-8	-7	-5	-4	-3	-2	-1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	18	19	19	19	19	19	19	19	19	19			
55	88	88	7,5,L				43	34	77	73	53	131	55	107	92	90	83	82	15	0	62	72	32	6	7	8	11	12	14	17	18	18	18	18	18	18	18	18	18	18			
-54	89	-91					-40	-33	77	73	55	-133	58	113	-94	92	-78	84	13	147	-60	-72	30	25	-88	-92	104	51	-74	-124													
				7,6,L				51	61	74	78	46	49	57	81	68	40	91	143	94	176	26	29	90	45	36	153	75	73	146	86	140	65	65	61	-64	-62	-62	-62	-62	-62		
-21	-20	-19	-15	-14	-13	-12	-11	-9	-6	-5	-4	-3	-2	-1	1	2	3	4	5	7	9	11	13	15	17	19	7,7,L				-16	-13	-12	-12	-12	-12	-12	-12	-12	-12			
-10	-7	-5	-4	-3	0	1	2	4	6	7	11	12	14	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	34	34	34	34	34	34	34	34			
36	102	32	76	97	134	137	136	52	110	83	39	62	106	-107	7,8,L				63	45	37	35	72	37	30	84	89	71	40	122	30	53	111	-107	-107	-107	-107	-107	-107	-107	-107		
-34	-106	-33	-78	99	132	137	-136	52	110	-83	39	62	106	-107					-62	-45	39	-35	69	42	-28	86	-88	67	-35	132	-25	-54	-107	-107	-107	-107	-107	-107	-107	-107	-107		
12	14	30	7,9,L				-12	5	6	9	10	80	7,10,L				-1	4	4	8,0,L				-20	-16	-14	-12	-10	-8	0	4	8	10	12	12	12	12	12	12	12	12	12	
93	30	34					77	82	76	58	80					65	59	94					61	60	123	24	29	185	202	172	110	18	18	18	18	18	18	18	18	18	18		
-93	14	34					-41	-66	72	-94	-87	-78	57	83					64	-59	90		62	56	125	18	30	176	-198	168	-105	-27	320	320	320	320	320	320	320	320	320	320	
14	16	18	20	8,1,L				-23	-20	-16	-14	-12	-11	-10	-9	-8	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	15	15	15	15	15	15	15	15

8,1,L	15	131	-133	13	36	37	16	55	58	-10	46	-47	2	60	58	-6	40	42
	16	35	-32	16	53	54	17	58	57	-8	67	67	4	35	30	-5	61	-59
16	117	118	-98	17	28	-30	19	68	-67	-6	102	98				-3	48	-43
17	114	115	74							-4	124	-122	8,9,L			-2	105	-99
21	46	-47	39	8,4,L						-3	121	-122				0	44	-44
			-50							-2	141	-142	-3	43	-40	1	76	-73
8,2,L	20	50		-20	53	-50	-16	83	84	0	122	111	3	145	-142	2	102	97
				-19	25	26	-15	37	-33	4	133	-127	4	93	83	3	50	-52
-19	32	-29		-17	52	-51	-14	52	55	6	102	98				5	113	111
-17	30	-24	80	-16	24	23	-11	52	55	9	154	145	9,0,L			6	65	63
-16	47	47	-57	-15	85	-86	-10	86	88	10	164	-158				7	92	89
-14	53	-48	-33	-13	27	27	-9	66	-63	14	69	61	-17	68	67	8	136	137
-13	61	-58	-99	-12	115	-121	-7	145	-149	16	55	-49	-15	53	49	10	27	-24
-11	81	86	39	-11	28	-26	-5	165	171				-13	26	-16	11	42	42
-9	215	214	-63	-10	89	87	-4	90	98	8,7,L			-11	147	140	13	97	98
-8	141	-132	-93	-9	109	-108	-2	78	78				-9	196	185	14	47	49
-7	49	-48	85	-8	39	45	-1	121	-131	-12	78	71	-7	143	-130			
-6	35	25	-29	-6	109	-113	0	60	-57	-7	69	-68	-5	100	-101	9,2,L		
-5	128	-127	51	-5	87	80	2	99	-99	-5	43	-52	-3	248	239			
-4	87	91	-71	-4	67	68	3	42	-37	0	96	97	1	79	-83	-17	51	-48
-3	158	152	-38	-2	52	-45	4	42	44	1	51	44	3	120	116	-14	26	-25
-1	123	122	-59	-1	98	-102	5	31	27	2	69	65	5	77	-75	-13	97	99
0	56	52	-20	0	77	-85	8	164	-165	6	87	-80	7	163	-157	-12	72	73
1	90	-92	61	1	45	50	9	55	-59	10	37	-34	9	26	-24	-11	71	-70
2	58	62	-42	4	117	-124	10	74	-72	11	72	65	15	53	-51	-10	27	26
5	209	205	64	6	42	-42	11	112	109				17	67	64	-9	54	-60
6	41	-44	55	7	121	127	15	44	-46	8,8,L						-8	90	-89
7	19	-22	-139	8	82	-78	16	95	-92				9,1,L			-6	27	25
8	102	105	-44	9	71	75	17	74	75	-9	54	52				-5	47	-47
9	214	-214	51	10	55	53				-8	50	-42				-4	53	51
10	107	106	-49	11	126	-126				-7	81	78	-16	42	-47	-2	66	-68
11	103	105	108	12	37	39				-4	106	107	-11	77	-71	-1	66	73
12	36	37	62	13	38	-35	-17	30	30	-3	62	64	-10	34	-39	0	37	-35
13	78	79	-95	14	82	-84	-13	48	-50	-1	84	77	-9	69	-68	1	134	127
14	93	-96	-52	15	96	102	-12	47	-50	1	47	-48	-7	29	-27			

[illegible]

Squalene adduct of hexakis(p-t-butylphenylthiomethyl) benzene,
 $C_{72}H_{90}S_6 \cdot 1/2(C_{30}H_{50})$, $M_r = 1353.3$, triclinic, $a = 14.710(5)$,
 $b = 15.773(6)$, $c = 20.417(5)$ Å, $\alpha = 107.40(2)$, $\beta = 113.93(3)$,
 $\gamma = 81.93(3)^\circ$, $U = 4131.8$ Å³, $D_c = 1.09$, $D_m = 1.10$ Mg m⁻³,
 $Z = 2$, $F(000) = 1466$, space group $P\bar{1}$, $\mu(Mo-K\alpha) = 2.04$ cm⁻¹.

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	0	11	24	25	0	2	6	31	37	0	4	12	23	22	0	5	2	28	-24	0	7	1	53	-45
0	0	12	64	-62	0	2	5	13	-10	0	4	11	11	-8	0	5	3	95	91	0	7	2	7	-9
0	0	13	12	-13	0	2	4	117	-113	0	4	10	10	6	0	5	4	63	67	0	7	3	23	-20
0	0	14	36	35	0	2	3	46	48	0	4	9	24	-19	0	5	5	78	-84	0	8	12	11	-8
0	0	17	18	18	0	2	2	35	-40	0	4	8	61	-63	0	5	6	15	19	0	8	8	13	-19
0	0	13	39	-38	0	2	0	72	75	0	4	7	12	-14	0	5	7	12	-13	0	8	5	20	-20
0	0	12	17	13	0	2	2	129	119	0	4	6	22	28	0	5	8	19	-15	0	8	4	15	-13
0	0	11	54	56	0	2	3	11	-11	0	4	4	81	83	0	5	9	11	10	0	8	3	27	27
0	0	10	13	-16	0	2	4	91	-75	0	4	2	105	-111	0	5	13	8	4	0	8	2	16	20
0	0	9	23	20	0	2	5	19	16	0	4	1	26	24	0	5	15	22	-24	0	8	2	17	12
0	0	8	18	16	0	2	6	128	-119	0	4	0	15	-18	0	5	14	13	-13	0	8	5	23	-25
0	0	6	17	-20	0	2	7	25	31	0	4	3	15	-13	0	6	11	21	20	0	8	6	64	-60
0	0	5	145	-137	0	2	8	28	29	0	4	4	194	172	0	6	10	12	13	0	8	8	16	16
0	0	4	10	12	0	2	16	20	-22	0	4	6	95	-95	0	6	8	10	6	0	8	10	15	-15
0	0	3	16	-11	0	2	17	21	-23	0	4	8	17	-18	0	6	6	28	26	0	8	12	21	17
0	0	1	44	60	0	3	14	10	-6	0	4	9	10	-6	0	6	5	30	-34	0	8	16	14	-16
0	0	1	131	-173	0	3	9	32	34	0	4	10	69	66	0	6	4	30	-63	0	8	15	20	-18
0	0	1	19	-20	0	3	6	14	13	0	4	12	11	10	0	6	2	26	26	0	9	13	28	-25
0	0	1	127	128	0	3	5	83	-84	0	4	13	7	8	0	6	0	51	56	0	9	12	11	11
0	0	1	18	-21	0	3	4	15	12	0	4	14	19	20	0	6	4	63	-52	0	9	9	35	34
0	0	1	43	-42	0	3	3	67	55	0	4	16	16	-16	0	6	5	22	22	0	9	8	11	14
0	0	1	92	97	0	3	2	14	10	0	4	17	20	-20	0	6	7	16	-14	0	9	7	13	-12
0	0	1	19	24	0	3	1	143	124	0	4	16	12	11	0	6	8	62	60	0	9	6	15	15
0	0	1	35	-29	0	3	0	18	16	0	4	15	12	9	0	6	10	29	-30	0	9	5	24	-23
0	0	1	14	-12	0	3	1	13	-14	0	4	14	11	-10	0	6	12	10	-9	0	9	1	83	80
0	0	1	15	-17	0	3	2	35	-32	0	4	13	13	-15	0	6	14	19	15	0	9	0	13	11
0	0	1	19	14	0	3	3	72	72	0	4	10	19	-18	0	6	15	18	19	0	9	1	27	-20
0	0	1	16	16	0	3	4	13	-11	0	4	9	64	-59	0	6	16	16	13	0	9	3	39	-39
0	0	1	14	-15	0	3	5	6	18	0	4	7	24	24	0	6	13	34	-32	0	9	5	24	21
0	0	1	10	7	0	3	7	27	27	0	4	6	9	10	0	6	11	27	30	0	9	7	22	22
0	0	2	11	-15	0	3	8	11	13	0	4	5	52	44	0	6	9	27	20	0	9	9	11	15
0	0	2	14	13	0	3	11	23	-22	0	4	3	89	-85	0	6	8	8	-9	0	9	10	15	13
0	0	2	12	-10	0	3	13	24	27	0	4	2	18	-18	0	6	6	29	-24	0	9	11	14	-15
0	0	2	11	22	0	3	17	9	-8	0	4	1	66	-52	0	6	2	6	-11	0	10	12	13	16
0	0	2	9	-20	0	4	16	20	-22	0	5	0	16	-14	0	7	1	65	67	0	10	11	12	-14
0	0	2	8	-51	0	4	15	12	12	0	5	1	34	30	0	7	0	19	17	0	10	7	11	14

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	10	4	12	14	0	-12	8	60	54	-1	-13	8	16	10	-1	-9	11	35	-34
0	10	3	12	-15	0	-12	10	27	-26	-1	-13	11	37	-34	-1	-9	13	13	-18
0	10	0	50	-47	0	-12	16	16	16	-1	-13	13	30	32	-1	-9	14	11	-11
0	-10	1	24	23	0	-13	7	48	-48	-1	-12	14	27	-24	-1	-9	17	17	19
0	-10	2	50	48	0	-13	6	11	-14	-1	-12	12	13	11	-1	-8	18	18	-17
0	-10	3	11	-9	0	-13	5	53	49	-1	-12	8	26	23	-1	-8	16	23	25
0	-10	4	34	33	0	-13	2	12	-10	-1	-12	6	34	-34	-1	-8	13	14	9
0	-10	5	18	-14	0	-13	7	15	-18	-1	-12	5	16	-15	-1	-6	8	36	30
0	-10	6	58	-55	0	-14	2	20	20	-1	-12	2	31	32	-1	-8	12	36	9
0	-10	8	23	-22	0	-14	3	16	-17	-1	-12	0	11	-10	-1	-8	10	46	-48
0	-10	10	25	23	0	-14	4	47	-42	-1	-12	5	9	-15	-1	-8	8	21	24
0	-10	12	26	27	0	-14	5	15	16	-1	-12	6	12	15	-1	-8	7	12	11
0	-10	14	19	-22	0	-14	6	16	19	-1	-11	3	11	-8	-1	-8	6	73	75
0	-11	17	17	-15	0	-15	5	13	-14	-1	-11	4	10	9	-1	-8	4	39	-37
0	-11	15	13	15	0	-15	3	13	-13	-1	-11	5	27	29	-1	-8	2	77	-67
0	-11	12	7	-10	0	-16	6	8	-8	1	-11	6	11	10	1	8	1	7	-6
0	-11	11	18	14	0	-17	5	11	12	1	-11	7	19	19	1	8	2	106	99
0	-11	9	34	-37	-1	-16	10	13	13	1	-11	9	24	-22	1	8	3	34	36
0	-11	7	12	-13	-1	-16	8	13	-14	1	-10	16	8	-8	1	8	4	30	-31
0	-11	5	37	39	-1	-15	3	15	16	1	-10	10	25	19	1	8	5	16	-16
0	-11	4	24	23	-1	-15	4	12	-15	1	-10	9	15	12	1	8	6	23	-19
0	-11	3	36	-34	-1	-15	5	24	-23	1	-10	8	26	-26	1	8	7	14	-16
0	-11	1	11	-9	-1	-15	7	11	12	1	-10	4	23	-20	1	8	8	18	20
0	-11	0	13	-16	-1	-15	11	9	-9	1	-10	1	14	14	1	8	10	15	15
0	11	3	18	16	-1	-14	10	21	18	1	10	5	11	10	1	7	7	54	-57
0	11	4	15	15	-1	-14	8	19	-19	1	9	11	12	-11	1	7	6	30	31
0	11	7	13	-15	-1	-14	6	31	32	1	9	5	20	18	1	7	5	12	10
0	12	6	13	12	-1	-14	5	23	21	1	9	4	15	-16	1	7	3	67	56
0	12	4	24	-24	-1	-14	4	24	-26	1	9	3	63	-65	1	7	2	17	-17
0	12	3	12	13	1	-14	6	9	-9	1	9	2	18	13	1	7	1	17	-17
0	12	2	11	10	1	-13	7	15	-14	1	9	1	21	18	-1	-7	1	16	-18
0	-12	1	19	19	1	-13	6	21	23	-1	-9	1	29	37	-1	-7	2	16	18
0	-12	2	10	11	-1	-13	1	32	-31	-1	-9	2	8	-9	-1	-7	3	10	7
0	-12	4	10	-10	-1	-13	3	10	9	-1	-9	3	11	-11	-1	-7	5	72	65
0	-12	6	17	-22	-1	-13	5	33	36	-1	-9	5	27	-29	-1	-7	6	38	-36
0	-12	7	17	16	-1	-13	7	29	-31	-1	-9	9	62	60	-1	-7	7	73	-62

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-1	3	4	9	6	-1	5	1	25	-19	1	-7	4	14	12	1	-9	17	13	-12
-1	3	7	24	-20	-1	5	3	11	11	1	-7	3	20	28	1	-9	15	20	22
-1	3	8	17	-20	-1	5	4	54	56	1	-7	2	9	9	1	-9	12	8	8
-1	3	9	29	33	-1	5	5	81	-72	1	-7	1	16	14	1	-9	9	28	-35
-1	3	10	19	-22	-1	5	7	59	63	-1	7	0	15	16	1	-9	7	27	27
-1	3	12	11	9	-1	5	8	14	-20	-1	7	1	42	-49	1	-9	4	12	12
-1	3	13	23	-27	-1	5	9	15	23	-1	7	5	15	13	1	-9	3	37	-39
-1	4	10	9	8	-1	5	10	18	-20	-1	7	7	43	52	1	-9	2	7	7
-1	4	9	20	23	-1	5	13	22	-25	-1	7	8	14	9	1	-9	1	18	16
-1	4	7	31	-31	-1	5	16	16	16	-1	7	11	38	-42	-1	9	3	19	20
-1	4	6	15	-15	-1	5	13	20	-21	-1	7	12	8	-9	-1	9	5	23	-19
-1	4	4	93	95	-1	5	12	42	-40	-1	7	13	14	14	-1	9	6	8	-6
-1	4	3	25	-21	-1	5	11	18	17	-1	7	15	15	16	-1	9	7	8	8
-1	4	2	59	-48	-1	5	9	11	17	-1	7	14	12	14	-1	10	8	19	-20
-1	4	1	18	17	-1	5	7	27	31	-1	7	9	13	-16	-1	10	7	16	16
-1	4	0	24	32	-1	5	6	17	16	-1	7	8	22	-20	-1	10	6	21	19
1	-4	1	16	18	-1	5	5	21	-23	-1	8	7	17	20	1	-10	3	15	14
1	-4	2	70	-61	-1	5	4	24	-25	-1	8	6	11	15	1	-10	4	30	27
1	-4	3	16	18	-1	5	3	30	-34	-1	8	5	12	10	1	-10	10	23	-18
1	-4	4	26	-17	-1	5	2	30	-28	-1	8	4	29	30	1	-10	18	17	16
1	-4	6	29	-19	-1	5	1	15	14	-1	8	3	20	-21	1	-11	17	22	-20
1	-4	7	14	12	-1	5	0	43	40	-1	8	2	17	-18	1	-11	15	20	22
1	-4	8	24	-22	1	-5	6	84	-62	1	-8	0	39	-36	1	-11	9	24	-26
1	-4	9	9	-6	1	-5	7	19	-17	1	-8	2	42	-41	1	-11	7	23	26
1	-4	10	44	37	1	-5	8	44	54	1	-8	3	15	16	1	-11	5	25	28
1	-4	12	21	-18	1	-5	12	41	-44	1	-8	4	128	121	1	-11	4	14	16
1	-4	13	17	-17	1	-5	13	19	-19	1	-8	5	18	-16	1	-11	3	47	-48
1	-4	14	27	27	1	-5	14	11	12	1	-8	6	8	4	1	-11	1	16	15
1	-5	13	20	24	1	-7	17	13	10	1	-8	7	11	-9	-1	11	1	16	14
1	-5	12	12	13	1	-7	16	8	-5	1	-8	8	34	-36	-1	11	3	14	15
1	-5	11	14	-12	1	-7	14	14	12	1	-8	10	7	-12	-1	11	4	16	15
1	-5	9	61	-62	1	-7	13	24	-25	1	-8	12	17	12	-1	11	7	15	-13
1	-5	8	21	-17	1	-7	12	12	7	1	-8	14	16	16	-1	12	4	19	-21
1	-5	7	237	211	1	-7	11	23	24	1	-8	16	27	-25	-1	12	2	16	16
1	-5	6	13	-14	1	-7	9	7	-1	1	-8	18	13	11	-1	12	0	15	17
1	-5	5	12	-11	1	-7	5	22	-20	1	-9	19	9	-8	1	-12	2	24	-21

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	2	18	12	15	-2	0	4	255	246	2	1	14	13	10	-2	-3	5	35	28
-2	1	17	11	-12	-2	0	5	27	-28	2	1	15	17	-18	-2	-3	4	28	21
-2	1	15	8	9	-2	0	6	134	-119	2	1	16	11	-15	-2	-3	3	75	-67
-2	1	11	25	29	-2	0	7	12	-15	2	2	14	23	-25	-2	-3	2	24	16
-2	1	10	24	-28	-2	0	8	31	27	2	2	13	11	13	-2	-3	1	95	116
-2	1	9	55	-54	-2	0	9	19	21	2	2	12	12	-13	-2	-3	0	91	87
-2	1	7	30	31	-2	0	10	16	14	2	2	10	34	35	2	3	1	53	53
-2	1	6	8	12	-2	0	12	53	52	2	2	9	21	-17	2	3	2	17	21
-2	1	5	30	-30	-2	0	13	11	12	2	2	8	44	41	2	3	3	58	-47
-2	1	4	44	47	-2	0	14	18	-21	2	2	7	18	-13	2	3	5	7	-8
-2	1	3	269	-242	-2	0	16	22	-24	2	2	6	50	-48	2	3	6	15	-14
-2	1	2	37	-36	-2	0	18	16	18	2	2	5	11	15	2	3	9	36	38
-2	1	1	52	58	-2	-1	19	15	13	2	2	4	10	-19	2	3	11	28	-28
2	-1	1	229	198	-2	-1	18	14	-15	2	2	2	118	117	2	4	14	12	-13
2	-1	2	19	18	-2	-1	17	36	-37	2	2	1	65	-65	2	4	8	40	40
2	-1	3	96	-84	-2	-1	16	9	10	2	2	0	149	-146	2	4	6	31	30
2	-1	4	9	8	-2	-1	13	40	38	-2	2	1	15	12	2	4	4	77	-69
2	-1	6	14	-14	-2	-1	11	6	3	-2	2	2	112	-106	2	4	3	21	18
2	-1	7	43	43	-2	-1	10	41	-37	-2	2	5	30	28	2	4	2	49	54
2	-1	9	11	12	-2	-1	9	69	-66	-2	2	7	21	-22	2	4	0	60	-45
2	-1	11	36	-39	-2	-1	8	11	11	-2	2	8	61	51	-2	-4	1	54	-56
2	-1	12	8	10	-2	-1	7	10	-6	-2	2	9	14	12	-2	-4	2	71	58
2	-1	14	12	11	-2	-1	6	84	82	-2	2	10	93	-96	2	-4	3	28	-28
2	0	14	14	11	-2	-1	5	124	122	-2	2	14	26	29	2	-4	4	19	12
2	0	12	17	22	-2	-1	4	41	-40	-2	2	16	13	9	-2	-4	5	8	-7
2	0	11	15	-20	-2	-1	3	48	-67	-2	2	17	12	12	-2	-4	6	9	-6
2	0	10	7	-4	-2	-1	2	13	-15	-2	2	18	14	-16	-2	-6	2	52	62
2	0	8	37	-35	-2	-1	1	97	101	-2	2	21	9	-11	-2	-6	4	18	-17
2	0	6	76	69	2	1	0	40	-38	-2	3	15	15	16	-2	-6	6	17	-16
2	0	4	52	-40	2	1	1	118	108	-2	3	14	17	-18	-2	-6	7	30	-29
2	0	3	19	19	2	1	3	109	100	-2	3	13	22	-23	-2	-6	8	25	-17
2	0	2	69	46	2	1	4	18	18	-2	3	11	7	8	-2	-6	9	7	38
2	0	1	11	10	2	1	5	65	67	-2	3	9	66	58	-2	-6	10	20	9
2	0	0	34	-47	2	1	7	61	-65	-2	3	8	9	9	-2	-6	12	24	17
-2	0	2	39	50	2	1	8	16	-13	-2	3	7	38	-42	-2	-6	13	10	-24
-2	0	3	31	26	2	1	11	21	20	-2	3	6	12	9	-2	-7	19	18	66

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	-7	17	19	-21	-2	-8	18	37	-37	-2	-11	7	39	38	-3	-16	2	10	-10
-2	-7	14	15	13	-2	-9	17	29	29	-2	-11	5	28	-29	3	16	0	12	-10
-2	-7	13	42	44	-2	-9	15	23	-25	-2	-11	4	14	-14	3	15	1	16	-16
-2	-7	9	22	24	-2	-9	13	27	23	2	11	1	27	23	-3	-15	11	22	28
-2	-7	7	67	-64	-2	-9	11	49	-49	2	11	3	18	-17	-3	-14	12	12	-13
-2	-7	6	32	-30	-2	-9	10	16	11	2	11	5	25	-25	-3	-14	9	12	12
-2	-7	5	52	49	-2	-9	9	46	46	2	11	7	18	18	-3	-14	7	17	14
-2	-7	3	63	57	-2	-9	7	12	-17	2	12	2	12	-13	-3	-14	6	32	-31
-2	-7	1	16	-16	-2	-9	6	15	19	-2	12	2	21	19	-3	-14	2	16	16
2	7	0	18	-16	-2	-9	5	44	-38	3	14	2	21	-18	3	14	2	17	-14
2	7	1	66	-68	-2	-9	4	17	-17	-2	12	8	38	-32	-3	-13	1	9	10
2	7	2	17	-13	-2	-9	3	59	56	-2	12	9	16	10	-3	-13	2	12	-11
2	7	4	15	-18	-2	-9	1	21	-25	-2	12	10	25	18	-3	-13	4	12	-12
2	7	5	66	67	2	9	1	16	15	-2	12	11	11	9	-3	-13	5	20	-22
2	7	6	15	11	2	9	2	26	28	-2	12	12	38	30	-3	-13	7	16	15
2	7	7	25	-25	2	9	3	28	-28	-2	12	14	30	-28	-3	-12	18	16	15
2	7	9	11	-10	2	10	10	11	11	-2	13	15	14	-13	-3	-12	14	7	-12
2	7	10	12	-13	2	10	7	15	-13	-2	13	13	24	28	-3	-12	12	21	15
2	7	11	15	19	2	10	6	26	-21	-2	13	11	26	-21	-3	-12	10	13	12
2	8	8	13	12	2	10	4	23	28	-2	13	9	14	10	-3	-12	8	14	-15
2	8	7	13	-12	2	10	0	20	18	-2	13	3	23	23	-3	-12	6	13	-15
2	8	6	27	-27	-2	-10	1	10	-10	-2	13	2	14	17	-3	-12	4	18	17
2	8	4	9	-8	-2	-10	2	21	-23	2	14	0	17	15	3	12	2	11	-12
2	8	2	17	19	-2	-10	3	11	13	3	12	3	30	32	3	12	3	16	-16
2	8	0	13	-12	-2	-10	5	19	18	3	11	7	15	-11	3	11	7	13	15
-2	-8	1	35	30	-2	-10	6	38	40	3	11	4	29	-25	3	11	4	21	22
-2	-8	2	34	23	-2	-10	8	38	-38	3	11	2	8	-15	3	11	2	13	16
-2	-8	4	89	-84	-2	-10	10	42	39	-2	14	1	17	17	3	11	1	18	19
-2	-8	6	62	65	-2	-10	14	21	23	-2	15	0	16	-16	3	11	0	11	-8
-2	-8	8	15	-9	-2	-10	16	18	-17	-2	16	2	15	-14	-3	-11	1	10	14
-2	-8	9	8	-8	-2	-10	20	11	10	-2	16	6	14	14	-3	-11	3	15	-15
-2	-8	10	19	-20	-2	-11	17	12	11	-2	17	7	17	16	-3	-11	5	37	-38
-2	-8	14	19	-18	-2	-11	15	14	12	-2	17	5	14	-14	-3	-11	7	50	52
-2	-8	15	18	-18	-2	-11	13	24	-26	-3	16	8	18	16	-3	-11	8	16	14
-2	-8	16	27	30	-2	-11	11	33	-28	-3	16	10	13	-13	-3	-11	9	18	14
-2	-8	17	10	11	-2	-11	8	10	-11	-3	16	4	22	20	-3	-11	10	11	6

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 2

HEXA HOST SQUALENE QUEST

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-3	-8	20	12	12	-3	-4	4	56	-56	-3	-2	12	23	-21	-3	-1	12	14	-18
-3	-8	18	26	-25	-3	-4	3	33	-34	-3	-2	10	13	12	-3	-1	13	29	26
-3	-8	17	12	12	-3	-4	2	34	-29	-3	-2	8	39	42	-3	-1	14	11	11
-3	-8	16	44	42	-3	-4	1	24	-23	-3	-2	7	10	-7	-3	-1	15	21	-25
-3	-8	12	37	-37	-3	-4	0	39	-51	-3	-2	6	30	28	-3	-1	17	13	-10
-3	-8	10	34	35	3	4	1	15	-14	-3	-2	5	32	26	-3	-1	18	13	-14
-3	-8	8	23	-23	3	4	2	25	16	-3	-2	4	31	-21	-3	-1	19	14	11
-3	-8	7	14	16	3	4	4	28	23	-3	-2	2	205	176	-3	0	18	13	13
-3	-8	4	45	-42	3	4	5	11	11	-3	-2	1	85	75	-3	0	16	22	23
-3	-8	3	12	-17	3	4	6	30	-30	3	2	0	15	12	-3	0	15	24	-20
-3	-8	2	75	66	3	4	8	23	-20	3	2	1	19	-21	-3	0	14	44	-46
-3	-8	2	25	-25	3	4	10	20	19	3	2	2	54	-57	-3	0	13	25	26
3	8	4	14	17	3	4	12	16	14	3	2	3	34	-32	-3	0	12	14	-19
3	8	8	12	13	3	4	14	17	-15	3	2	4	22	21	-3	0	10	49	44
3	8	9	15	18	3	3	11	12	12	3	2	6	22	20	-3	0	9	21	-21
3	7	4	12	-13	3	3	9	14	-15	3	2	9	7	-5	-3	0	8	12	-9
3	7	2	18	14	3	3	7	47	-43	3	2	10	32	-28	-3	0	7	11	8
3	7	1	30	32	3	3	6	12	8	3	2	12	26	30	-3	0	6	103	-87
3	7	0	21	25	3	3	5	71	71	3	2	17	13	-15	-3	0	5	25	26
-3	-7	1	84	-70	3	3	3	63	56	3	1	13	17	18	-3	0	4	49	51
-3	-7	2	19	20	3	3	2	26	20	3	1	9	19	-15	-3	0	3	18	18
-3	-7	3	26	-29	3	3	1	17	15	3	1	7	24	-20	-3	0	2	79	88
-3	-7	5	103	85	3	3	0	31	26	3	1	5	36	35	-3	0	1	61	-61
-3	-7	6	16	-14	-3	-3	1	64	39	3	1	3	80	70	-3	0	1	21	-19
-3	-7	7	33	-30	-3	-3	2	68	-68	3	1	1	61	40	-3	0	2	53	44
-3	-7	8	13	13	-3	-3	3	76	-63	3	1	0	47	-48	-3	0	3	10	9
-3	-7	13	37	36	-3	-3	5	29	36	-3	-1	1	128	-137	-3	0	6	66	67
-3	-7	15	34	-30	-3	-3	6	14	-14	-3	-1	2	34	26	-3	0	8	9	9
-3	-7	16	8	-7	-3	-3	7	71	-57	-3	-1	3	55	-55	-3	0	10	52	-49
-3	-7	17	34	-34	-3	-3	9	12	-11	-3	-1	4	24	-23	-3	0	11	14	-17
-3	-7	19	15	16	-3	-3	10	19	17	-3	-1	5	13	12	-3	0	12	13	14
-3	-6	18	27	27	-3	-3	11	20	19	-3	-1	6	41	35	-3	-1	15	29	31
-3	-6	17	12	-14	-3	-3	13	26	27	-3	-1	7	44	-52	-3	-1	11	36	-40
-3	-6	16	24	21	-3	-3	15	13	-15	-3	-1	8	12	12	-3	-1	10	22	24
-3	-6	14	24	-25	-3	-3	18	13	-10	-3	-1	9	13	-16	-3	-1	9	49	47
-3	-6	13	13	10	-3	-3	16	23	25	-3	-1	11	20	18	-3	-1	7	34	-32

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 6

HEXA HOST SQUALENE QUEST

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	-1	6	19	-18	3	-3	16	10	-11	3	-4	4	32	-34	3	-6	14	17	22
3	-1	2	26	28	3	-3	13	21	20	3	-4	6	109	89	3	-6	18	25	-25
3	-1	1	159	139	3	-3	11	15	-18	3	-4	8	36	-44	3	-7	13	14	14
-3	1	0	10	-8	3	-3	7	98	-88	3	-4	12	33	39	3	-7	11	53	-53
-3	1	1	288	254	3	-3	5	60	57	3	-4	14	9	-9	3	-7	7	37	37
-3	1	2	31	-33	3	-3	3	12	12	3	-5	17	17	-18	3	-7	5	25	20
-3	1	3	139	-127	3	-3	1	66	-53	3	-5	13	47	49	3	-7	2	9	-8
-3	1	4	28	-26	-3	3	0	32	-26	-3	5	11	23	-28	-3	7	1	12	12
-3	1	5	106	-94	-3	3	1	72	77	-3	5	9	8	-11	-3	7	3	17	-22
-3	1	6	47	-38	-3	3	3	93	-87	-3	5	7	30	-28	-3	7	5	28	-39
-3	1	7	51	65	-3	3	4	72	-66	-3	5	3	148	134	-3	7	7	24	24
-3	1	8	17	21	-3	3	5	30	27	-3	5	2	23	25	-3	7	9	18	21
-3	1	9	91	85	-3	3	6	26	26	-3	5	1	86	-83	-3	8	10	36	-37
-3	1	10	28	27	-3	3	7	14	-9	-3	5	0	18	-15	-3	8	8	22	25
-3	1	11	37	-39	-3	3	8	11	-8	-3	5	2	11	-12	-3	8	2	13	-15
-3	1	12	9	-12	-3	3	9	37	32	-3	5	3	52	-44	-3	8	0	11	17
-3	1	13	20	-20	-3	3	10	23	25	-3	5	5	78	75	3	-8	2	19	17
-3	1	15	24	25	-3	3	11	25	-26	-3	5	6	10	14	3	-8	4	37	-29
-3	2	14	14	17	-3	3	14	11	-15	-3	5	7	18	-19	3	-8	5	9	4
-3	2	12	13	-13	-3	3	15	12	9	-3	5	8	26	26	3	-8	6	21	19
-3	2	11	10	-10	-3	4	13	15	14	-3	5	9	74	-76	3	-8	10	33	21
-3	2	10	44	-46	-3	4	12	20	18	-3	5	10	30	-32	3	-8	12	32	39
-3	2	7	12	-13	-3	4	11	29	-26	-3	5	11	37	42	3	-9	11	11	-11
-3	2	6	85	87	-3	4	10	61	-62	-3	6	12	25	-33	3	-9	5	20	-20
-3	2	5	12	11	-3	4	9	22	21	-3	6	11	21	28	3	-9	3	32	31
-3	2	4	7	0	-3	4	8	70	64	-3	6	10	15	18	3	-9	1	29	-22
-3	2	3	13	-12	-3	4	7	35	-36	-3	6	9	14	-17	3	-9	1	29	29
-3	2	2	17	-15	-3	4	5	25	-21	-3	6	7	36	-39	-3	9	2	14	17
-3	2	1	32	32	-3	4	4	30	34	-3	6	6	43	-47	-3	9	3	15	-18
-3	2	0	71	-73	-3	4	3	33	28	-3	6	5	49	42	-3	9	7	24	25
-3	2	1	29	28	-3	4	2	60	-46	-3	6	4	60	62	-3	9	12	13	14
3	-2	2	81	73	-3	4	1	32	31	-3	6	3	35	32	-3	10	13	16	17
3	-2	3	8	10	-3	4	0	31	-26	-3	6	2	98	-88	-3	10	10	25	-25
3	-2	10	13	15	3	-4	1	19	-17	3	-6	4	58	-43	-3	10	8	11	10
3	-2	12	22	27	3	-4	2	68	66	3	-6	6	81	84	-3	10	6	38	37
3	-2	14	44	-42	3	-4	3	15	-13	-3	-6	10	33	-35	-3	10	3	14	-14

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 10

HEXA HOST SQUALENE QUEST

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3-14	2	2	18	-17	4-11	2	2	19	16	4-8	2	2	56	50	-4	5	9	12	9
3-14	4	3	23	25	4-11	3	3	35	27	4-8	1	1	21	19	-4	5	8	14	-9
3-14	8	5	15	-12	4-11	5	5	11	8	-4	8	0	20	-21	-4	5	7	33	-30
3-15	5	9	9	-8	4-11	9	11	11	16	-4	8	3	11	-10	-4	5	6	27	30
3-15	4	8	8	6	4-11	15	13	13	-13	-4	5	5	18	12	-4	5	5	21	17
-3-15	4	11	11	10	4-11	10	13	13	-16	-4	8	7	13	11	-4	5	4	13	10
-3-16	0	16	16	13	4-11	8	18	18	-13	-4	8	9	12	11	-4	5	3	8	8
4-15	7	14	17	18	4-11	6	22	22	22	-4	8	11	21	-23	-4	5	1	16	16
4-14	10	17	17	19	4-11	5	8	8	14	-4	8	12	17	16	4	-5	1	44	-39
-4-14	0	21	21	19	4-11	4	30	30	-28	-4	7	11	15	-12	4	-5	2	14	13
-4-14	1	13	13	6	4-11	3	13	13	-10	-4	7	10	23	24	4	-5	3	45	38
-4-14	2	16	20	-16	-4-11	1	13	13	10	-4	7	7	14	15	4	-5	7	28	-24
-4-13	5	20	26	-29	-4-11	4	16	17	17	-4	7	5	7	-3	4	-5	9	46	49
-4-13	3	2	20	24	-4-11	6	31	31	-32	-4	7	3	25	-23	4	-4	11	9	-8
-4-13	1	33	33	33	-4-11	8	12	12	16	-4	7	1	36	35	4	-4	9	11	13
4-13	1	14	14	-8	-4-11	14	10	10	-11	4	-7	1	47	38	4	-4	8	15	14
4-13	3	20	20	-20	-4-11	13	15	15	-12	4	-7	3	42	-46	4	-4	6	19	18
4-13	5	22	22	-18	-4-11	8	15	15	13	4	-7	5	25	-23	4	-4	5	13	-9
4-13	7	14	14	19	-4-11	7	36	36	-16	4	-7	9	29	32	4	-4	4	69	-66
4-12	8	21	21	-22	-4-11	6	19	19	-40	4	-7	11	15	-11	4	-4	2	16	-19
4-12	7	9	9	-9	-4-11	5	23	23	22	4	-7	15	17	-18	-4	4	0	25	-24
4-12	6	36	36	40	-4-11	1	24	24	20	4	-7	17	13	18	-4	4	2	66	62
4-12	4	18	18	-20	-4-11	9	18	18	22	4	-6	16	17	18	-4	4	3	41	41
4-12	2	32	32	-35	-4-11	0	50	50	-20	4	-6	14	28	-32	-4	4	5	53	-54
-4-12	0	18	18	17	4-11	1	11	11	-51	4	-6	6	52	46	-4	4	6	13	-6
-4-12	1	9	9	-13	4-11	2	30	30	10	4	-6	2	50	-45	-4	4	7	32	-35
-4-12	2	33	33	30	4-11	3	11	11	27	4	-6	1	12	-12	-4	4	9	17	15
-4-12	5	14	14	13	4-11	4	24	24	11	-4	6	2	48	47	-4	4	10	10	-14
-4-12	6	22	22	-21	4-11	5	20	20	21	-4	6	3	16	19	-4	4	11	15	-19
-4-12	7	13	13	-13	4-11	7	12	12	-25	-4	6	4	30	-22	-4	4	12	18	16
-4-11	10	8	8	-7	4-11	13	15	15	12	-4	6	6	53	-44	-4	4	13	18	17
-4-11	7	11	11	-11	4-11	15	20	20	-17	-4	6	7	11	-10	-4	4	14	18	-18
-4-11	3	18	18	17	4-11	8	19	19	23	-4	6	12	10	-7	-4	3	15	15	-16
-4-11	0	20	20	-21	4-11	4	12	12	-14	-4	5	18	8	-10	-4	3	14	12	9
4-11	1	20	20	-23	4-11	3	25	25	-28	-4	5	11	33	27	-4	3	9	48	50

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-4	2	10	39	-39	-4	0	9	41	-46	-4	2	1	49	44	-4	-4	5	14	-9
-4	2	11	15	-14	-4	0	10	15	14	-4	2	0	40	29	-4	-4	6	111	116
-4	2	12	43	34	-4	0	12	14	14	-4	-2	1	56	48	-4	-4	7	10	13
-4	2	14	13	9	-4	0	13	17	16	-4	-2	2	156	145	-4	-4	8	60	-66
-4	2	17	16	17	-4	0	14	22	-23	-4	-2	3	24	-26	-4	-4	11	6	-5
-4	2	18	22	-23	-4	-1	17	7	2	-4	-2	7	16	-19	-4	-4	13	19	-18
-4	1	13	11	11	-4	-1	15	14	-16	-4	-2	9	24	-25	-4	-4	14	38	43
-4	1	12	29	-29	-4	-1	13	32	34	-4	-2	12	24	-25	-4	-4	15	15	15
-4	1	11	58	-65	-4	-1	12	12	-10	-4	-2	13	7	-7	-4	-4	16	10	-13
-4	1	10	42	43	-4	-1	11	7	-9	-4	-2	14	14	-12	-4	-4	17	8	10
-4	1	9	39	38	-4	-1	10	23	19	-4	-2	16	22	22	-4	-4	18	26	-27
-4	1	8	18	19	-4	-1	9	21	23	-4	-3	16	18	-20	-4	-4	19	15	-14
-4	1	6	15	-18	-4	-1	8	13	9	-4	-3	15	44	-44	-4	-4	20	19	21
-4	1	5	54	-44	-4	-1	7	18	15	-4	-3	14	13	12	-4	-5	19	20	-19
-4	1	4	22	-24	-4	-1	5	62	-44	-4	-3	13	41	41	-4	-5	18	11	10
-4	1	3	21	19	-4	-1	3	131	121	-4	-3	11	26	28	-4	-5	17	25	24
-4	1	2	47	-46	-4	-1	2	36	32	-4	-3	10	22	22	-4	-5	15	10	11
-4	1	1	47	35	-4	-1	1	40	-45	-4	-3	9	11	12	-4	-5	11	20	-16
-4	1	0	12	-10	4	1	0	16	-16	-4	-3	7	92	-100	-4	-5	9	27	-30
4	-1	1	158	133	4	1	1	102	97	-4	-3	5	47	-55	-4	-5	7	80	72
4	-1	3	73	-65	4	1	2	33	-38	-4	-3	3	217	189	-4	-5	6	15	-19
4	-1	7	21	-18	4	1	4	10	10	-4	-3	2	52	-50	-4	-5	5	25	-29
4	-1	9	9	7	4	1	5	67	-58	-4	-3	1	38	-47	-4	-5	3	6	2
4	-1	11	9	9	4	1	9	29	28	-4	3	1	36	-39	-4	-5	2	24	-21
4	-1	13	11	-13	4	1	13	25	-29	-4	3	7	10	12	-4	-5	1	52	-54
4	0	14	13	-12	4	1	14	15	-16	-4	3	9	20	-19	4	5	0	36	-37
4	0	4	35	43	4	1	15	17	20	4	3	11	9	7	4	5	1	32	32
4	0	3	16	17	4	2	14	12	12	4	4	8	10	-15	4	5	5	14	-14
4	0	2	10	-16	4	2	12	16	-15	4	4	7	10	9	4	6	12	8	11
4	0	0	22	-28	4	2	10	31	-34	4	4	6	8	-6	4	6	6	24	-29
-4	0	1	31	-36	4	2	9	12	15	4	4	4	19	18	4	6	5	13	13
-4	0	3	31	29	4	2	8	44	44	4	4	4	13	11	4	6	4	21	21
-4	0	4	33	-45	4	2	6	26	25	4	4	1	18	20	4	6	3	15	-18
-4	0	6	67	62	4	2	4	37	33	4	4	0	61	62	4	6	1	13	-12
-4	0	7	12	19	4	2	3	22	-23	-4	-4	2	50	-45	-4	-6	1	27	27
-4	0	8	72	-74	4	2	2	101	-93	-4	-4	4	11	17	-4	-6	2	26	27

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-4	-8	13	16	-16	4	11	3	26	23	-4	-15	3	16	-14	-5	-11	4	16	-13
-4	-8	15	9	-10	4	12	5	13	12	-4	-16	7	13	10	-5	-11	5	30	-24
-4	-8	16	34	33	4	12	2	12	12	-4	-16	10	16	-14	-5	-11	7	19	-21
-4	-9	17	19	20	4	12	1	14	-14	-4	-17	9	13	12	-5	-11	11	46	43
-4	-9	15	83	-78	-4	-12	2	21	-25	-5	-17	7	16	-14	-5	-11	13	32	-36
-4	-9	14	15	15	-4	-12	3	12	10	-5	-17	8	9	8	-5	-11	15	31	-23
-4	-9	11	72	71	-4	-12	4	42	41	-5	-17	9	18	19	-5	-11	19	18	16
-4	-9	10	9	-12	-4	-12	5	12	-11	-5	-16	12	17	-13	-5	-10	20	16	-20
-4	-9	9	17	-17	-4	-12	6	11	-12	-5	-16	10	14	-11	-5	-10	16	10	7
-4	-9	7	22	-22	-4	-12	10	23	-18	-5	-16	8	25	23	-5	-10	14	24	17
-4	-9	5	18	-17	-4	-12	12	17	-12	-5	-16	4	20	-19	-5	-10	12	25	-23
-4	-9	3	49	47	-4	-12	13	15	10	-5	-15	5	17	19	-5	-10	10	13	-12
-4	-9	2	13	10	-4	-12	14	17	14	-5	-14	16	18	17	-5	-10	8	38	42
-4	-9	1	27	-25	-4	-12	16	11	-14	-5	-14	12	11	-8	-5	-10	6	14	-8
4	9	0	13	12	-4	-13	17	11	-8	-5	-14	10	25	-22	-5	-10	3	7	9
4	9	1	31	-30	-4	-13	15	15	19	-5	-13	3	22	22	5	10	0	45	43
4	9	3	14	17	-4	-13	10	22	20	-5	-13	7	19	17	5	10	2	13	-14
4	9	5	15	18	-4	-13	9	33	-31	-5	-13	9	14	-16	5	10	4	39	-41
4	9	9	15	-12	-4	-13	8	8	6	-5	-13	11	11	-12	5	10	6	16	15
4	10	5	12	14	-4	-13	7	26	29	-5	-13	13	9	7	5	10	8	14	15
4	10	2	9	9	-4	-13	3	40	-41	-5	-13	13	13	18	5	9	10	8	12
4	10	0	17	16	4	13	1	19	18	-5	-13	15	13	13	5	9	3	26	12
-4	-10	2	29	-26	4	13	3	13	14	-5	-13	17	20	-18	5	9	1	13	25
-4	-10	3	11	12	4	13	4	9	9	-5	-12	14	15	14	5	9	1	13	-16
-4	-10	4	18	22	4	13	5	21	-18	-5	-12	13	12	11	-5	-9	2	14	-18
-4	-10	10	40	-40	4	14	4	16	-16	-5	-12	11	14	11	-5	-9	11	25	22
-4	-10	11	17	12	4	14	0	14	14	-5	-12	10	23	-24	-5	-9	13	14	-12
-4	-10	13	15	11	-4	-14	2	9	7	-5	-12	8	19	-21	-5	-8	16	12	9
-4	-10	14	72	59	-4	-14	6	31	-31	-5	-12	4	36	37	-5	-8	18	13	-14
-4	-10	16	34	-35	-4	-14	8	31	30	5	12	0	15	-15	-5	-8	15	10	-7
-4	-11	15	17	-9	-4	-14	10	13	9	5	11	5	12	15	-5	-8	14	26	27
-4	-11	13	25	-23	-4	-14	12	14	-15	5	11	1	30	-35	-5	-8	12	43	-43
-4	-11	12	16	-11	-4	-15	15	10	-6	5	11	0	25	25	-5	-8	11	16	12
-4	-11	11	64	50	-4	-15	11	22	22	-5	-11	1	23	21	-5	-8	9	14	-16
-4	-11	7	12	11	-4	-15	10	8	7	-5	-11	2	9	8	-5	-8	8	45	44
4	11	1	23	-23	-4	-15	6	13	-12	-5	-11	3	17	20	-5	-8	5	16	15

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-5	-6	2	69	-75	-5	-4	7	20	19	-5	-2	16	12	12	-5	-1	10	13	15
-5	-6	1	12	13	-5	-4	6	27	26	-5	-2	14	16	-19	-5	-1	11	60	-55
5	6	0	33	-30	-5	-4	5	13	-15	-5	-2	12	23	-23	-5	-1	15	21	22
5	6	3	12	-11	-5	-4	4	89	77	-5	-2	11	16	13	-5	-1	17	14	14
5	6	4	53	53	-5	-4	3	22	-19	-5	-2	10	52	51	-5	-1	18	11	14
5	6	6	12	-12	-5	-4	2	70	-72	-5	-2	9	13	12	-5	-1	19	17	-18
5	6	8	17	-19	-5	-4	1	31	-28	-5	-2	8	7	6	-5	-1	20	12	-10
5	5	9	15	-13	5	4	0	41	37	-5	-2	7	9	-12	-5	0	16	16	-18
5	5	5	15	14	5	4	1	11	15	-5	-2	4	39	-49	-5	0	15	18	21
5	5	4	7	10	-5	4	3	19	23	-5	-2	3	31	-26	-5	0	14	20	22
5	5	3	12	-11	-5	4	4	10	-5	-5	-2	1	10	-11	-5	0	11	13	-16
5	5	2	23	-27	5	4	5	20	-23	5	2	0	73	74	-5	0	10	30	27
5	5	1	48	-40	5	4	6	18	19	5	2	1	29	24	-5	0	9	32	-32
5	5	0	16	-20	5	4	10	11	13	5	2	2	91	-80	-5	0	8	31	-34
-5	-5	1	52	57	5	4	12	15	-14	5	2	4	35	32	-5	0	7	35	34
-5	-5	2	29	28	5	3	11	12	10	5	2	6	17	-16	-5	0	6	46	53
-5	-5	4	38	32	5	3	9	23	-26	5	2	7	13	-14	-5	0	3	16	12
-5	-5	5	43	-41	5	3	7	24	20	5	2	8	31	33	-5	0	1	12	-15
-5	-5	6	14	13	5	3	5	15	-18	5	2	14	15	14	5	0	0	33	-29
-5	-5	7	60	44	5	3	3	10	13	5	1	13	21	-22	5	0	1	26	-27
-5	-5	9	31	-34	5	3	1	15	-14	5	1	12	12	14	-5	0	2	14	21
-5	-5	10	6	-5	5	3	0	10	8	5	1	11	21	18	5	0	3	24	22
-5	-5	11	62	58	-5	-3	1	10	15	5	1	7	12	10	5	0	4	85	81
-5	-5	13	22	-18	-5	-3	2	9	-10	5	1	5	32	-30	5	0	5	14	16
-5	-5	16	10	-11	-5	-3	3	83	90	5	1	2	29	-31	5	0	6	39	-45
-5	-5	21	10	8	-5	-3	4	11	11	5	1	1	133	129	5	0	12	17	17
-5	-4	20	13	13	-5	-3	5	22	-29	5	1	0	28	22	5	-1	13	15	14
-5	-4	18	17	16	-5	-3	6	13	-14	-5	-1	1	65	-62	5	-1	11	11	13
-5	-4	16	35	-34	-5	-3	7	30	28	-5	-1	2	21	16	5	-1	9	25	-25
-5	-4	15	12	12	-5	-3	9	24	18	-5	-1	3	13	-18	5	-1	7	20	17
-5	-4	14	33	33	-5	-3	10	16	-15	-5	-1	4	11	-11	5	-1	6	13	14
-5	-4	13	11	-11	-5	-3	11	7	13	-5	-1	5	41	27	5	-1	5	29	30
-5	-4	12	22	-22	-5	-3	15	25	-23	-5	-1	6	12	-13	5	-1	4	12	14
-5	-4	11	11	10	-5	-3	16	16	-14	-5	-1	7	67	59	5	-1	3	44	-35
-5	-4	10	28	28	-5	-3	17	16	17	-5	-1	8	12	-12	5	-1	1	31	32
-5	-4	8	106	-90	-5	-3	18	8	7	-5	-1	9	14	-17	-5	1	0	11	9

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-5	3	1	33	31	-5	5	0	25	24	5	-8	1	34	33	-6	9	1	15	16
-5	3	2	17	-17	-5	5	1	22	-21	5	-8	2	41	36	-6	9	0	18	-17
-5	3	3	91	87	-5	5	3	34	-34	5	-8	3	14	-10	6	-9	1	14	-12
-5	3	4	12	-15	-5	5	4	25	-29	5	-8	4	20	21	6	-9	2	18	19
-5	3	7	57	-65	-5	5	5	19	15	5	-8	6	24	-24	6	-9	3	10	-12
-5	3	8	25	-21	-5	5	6	13	-13	5	-9	15	12	11	6	-8	10	14	11
-5	3	9	44	43	-5	5	11	21	-20	5	-9	7	23	-21	6	-8	4	14	-16
-5	3	11	9	12	-5	5	12	18	19	5	-9	5	58	55	-6	8	0	15	-17
-5	3	14	10	8	-5	5	6	48	44	5	-9	1	21	-22	-6	8	8	21	-21
-5	3	15	22	-21	-5	5	3	25	25	-5	9	1	16	13	-6	8	1	13	12
-5	3	16	17	18	-5	5	6	21	-18	-5	9	5	16	18	-6	8	2	29	17
-5	4	15	17	-15	-5	5	2	30	-32	-5	9	6	17	21	-6	8	3	14	17
-5	4	14	25	-23	-5	5	0	39	37	-5	9	7	19	-16	-6	8	4	23	-30
-5	4	13	13	12	-5	5	4	24	20	-5	9	8	18	-20	-6	8	5	11	-8
-5	4	11	13	11	-5	5	6	29	-30	-5	10	9	11	10	-6	8	6	9	10
-5	4	8	43	43	-5	5	6	10	-7	-5	10	8	15	10	-6	8	7	14	15
-5	4	7	8	-7	-5	5	7	18	22	-5	10	6	11	-16	-6	7	16	11	-12
-5	4	6	42	43	-5	5	9	11	-12	-5	10	2	19	16	-6	7	14	17	16
-5	4	5	26	-23	-5	5	10	8	-7	-5	10	2	25	27	-6	7	13	16	-14
-5	4	4	131	-127	-5	5	12	20	24	-5	10	4	22	-20	-6	7	9	28	-26
-5	4	3	35	40	-5	5	9	18	16	-5	10	6	15	14	-6	7	8	10	-10
-5	4	2	26	-20	-5	5	3	10	-11	-5	10	10	27	-27	-6	7	5	32	8
-5	4	0	56	57	-5	5	1	57	55	-5	11	1	17	-19	-6	7	4	17	-18
-5	4	2	17	-17	-5	5	1	43	-41	-5	11	7	25	27	-6	7	3	21	-24
5	-4	2	19	-12	-5	5	2	10	-7	-5	11	9	19	-17	-6	7	2	18	-18
5	-4	6	15	13	-5	5	3	18	-17	-5	11	7	13	-10	-6	7	1	12	30
5	-4	8	52	53	-5	5	9	9	6	-5	11	3	16	-12	-6	7	3	15	13
5	-4	10	29	-28	-5	5	10	19	22	-5	11	2	15	17	6	-7	5	14	-14
5	-4	12	30	-27	-5	5	11	29	-32	-5	11	3	27	-28	6	-7	6	38	-12
5	-5	13	22	-18	-5	5	12	13	-14	-5	12	2	12	-13	6	-7	7	19	20
5	-5	11	20	19	-5	5	8	16	-12	-5	12	1	18	17	6	-6	12	12	12
5	-5	9	22	15	-5	5	3	15	12	-5	12	2	35	33	6	-6	10	12	-9
5	-5	7	24	-27	-5	5	6	22	26	-5	12	6	16	14	6	-6	6	18	-15
5	-5	5	34	-32	-5	5	8	14	14	-5	12	8	15	-20	6	-6	4	12	10
5	-5	3	29	-27	-5	5	8	1	-17	-5	12	10	9	9	6	-6	3	16	-16
5	-5	1	96	91	-5	5	8	67	-64	-5	13	11	12	-10	6	-6	2	8	4

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	6	0	35	-35	-6	4	11	21	23	-6	1	12	23	24	-6	-1	19	18	-19	-6	-3	11	26	-27
-6	6	1	14	-12	-6	4	12	25	-23	-6	1	11	60	64	-6	-1	16	11	12	-6	-3	9	46	-43
-6	6	2	17	15	-6	4	15	13	-13	-6	1	10	16	-17	-6	-1	15	29	30	-6	-3	8	34	30
-6	6	4	15	14	-6	3	9	27	-35	-6	1	9	21	-22	-6	-1	9	49	-53	-6	-3	7	107	108
-6	6	5	10	10	-6	3	7	14	-13	-6	1	8	16	-15	-6	-1	7	47	43	-6	-3	6	14	-16
-6	6	6	16	15	-6	3	6	18	-15	-6	1	7	43	-40	-6	-1	5	10	-8	-6	-3	5	55	-36
-6	6	7	11	12	-6	3	4	21	-17	-6	1	6	22	-23	-6	-1	4	26	-26	-6	-3	3	43	-43
-6	6	8	43	-45	-6	3	3	35	32	-6	1	5	32	-28	-6	-1	2	11	12	-6	-3	2	33	-29
-6	6	9	13	-16	-6	3	2	7	4	-6	1	4	20	21	-6	1	0	32	26	-6	-3	1	56	44
-6	5	13	20	17	-6	3	1	15	-18	-6	1	3	71	74	-6	1	1	19	14	-6	3	1	26	-21
-6	5	12	14	-10	-6	3	1	12	8	-6	1	1	80	73	-6	1	1	10	-6	-6	3	2	24	26
-6	5	11	23	-20	-6	3	4	10	-8	-6	1	1	16	-20	-6	1	3	10	-9	-6	3	3	58	53
-6	5	9	14	-13	-6	3	5	20	-21	-6	1	0	32	-33	-6	1	11	18	18	-6	3	5	28	-26
-6	5	8	26	29	-6	3	6	16	-17	-6	1	2	18	14	-6	2	14	10	9	-6	3	6	8	-5
-6	5	7	28	26	-6	3	9	16	-14	-6	1	3	13	-17	-6	2	13	8	-9	-6	4	12	17	-16
-6	5	6	31	-31	-6	3	11	26	22	-6	1	7	40	42	-6	2	12	13	-15	-6	4	10	13	16
-6	5	5	23	-16	-6	3	13	19	-20	-6	1	12	13	-13	-6	2	6	20	-21	-6	4	6	11	8
-6	5	2	10	8	-6	2	12	24	-25	-6	1	13	16	19	-6	2	5	9	23	-6	4	4	60	-62
-6	5	1	31	-29	-6	2	8	19	21	-6	0	8	22	-19	-6	2	4	28	7	-6	4	3	29	25
-6	5	0	23	23	-6	2	4	18	13	-6	0	6	10	-4	-6	2	2	13	20	-6	4	2	28	20
6	-5	1	10	16	-6	2	2	18	-13	-6	0	4	56	50	-6	2	1	20	21	-6	4	1	22	-26
6	-5	7	12	-14	-6	2	0	34	35	-6	0	2	69	49	-6	2	0	115	102	-6	4	0	63	63
6	-5	11	29	25	-6	2	1	9	7	-6	0	1	34	-34	-6	-2	1	18	-17	-6	-4	1	35	-38
6	-5	13	16	-17	-6	2	2	26	-21	-6	0	0	62	-64	-6	-2	2	58	-56	-6	-4	4	53	-45
6	-4	10	14	-17	-6	2	4	17	-16	-6	0	2	36	-36	-6	-2	3	18	-19	-6	-4	6	40	-38
6	-4	9	14	-17	-6	2	5	23	23	-6	0	4	34	33	-6	-2	4	35	-25	-6	-4	7	17	14
6	-4	8	29	29	-6	2	6	29	-30	-6	0	6	10	15	-6	-2	5	13	19	-6	-4	8	88	85
6	-4	4	23	24	-6	2	3	31	33	-6	0	7	24	28	-6	-2	6	18	14	-6	-4	9	16	15
6	-4	2	12	-12	-6	2	10	25	25	-6	0	8	33	-30	-6	-2	7	13	-12	-6	-4	10	31	27
6	-4	1	12	-14	-6	2	11	15	13	-6	0	11	9	-10	-6	-2	8	28	35	-6	-4	11	10	11
-6	4	0	9	5	-6	2	12	32	-30	-6	0	13	15	-17	-6	-2	9	15	16	-6	-4	12	61	-64
-6	4	4	17	8	-6	2	13	11	-14	-6	0	14	22	22	-6	-2	10	19	15	-6	-4	13	19	-17
-6	4	5	13	13	-6	2	14	11	15	-6	0	15	24	22	-6	-3	20	9	-12	-6	-4	14	17	19
-6	4	8	15	17	-6	1	17	16	16	-6	0	16	37	-36	-6	-3	19	21	-21	-6	-4	19	16	16
-6	4	9	22	-19	-6	1	16	22	-21	-6	0	17	12	-9	-6	-3	15	15	16	-6	-4	20	20	-20
-6	4	10	38	39	-6	1	15	35	-37	-6	0	20	15	14	-6	-3	12	10	-7	-6	-5	17	15	17

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

HEXA HOST SQUALENE QUEST

PAGE 16

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	-5	13	77	-78	-6	-7	19	11	-7	-6	-9	11	14	-15	-7	-12	10	15	12
-6	-5	12	17	16	-6	-7	17	22	-17	-6	-9	8	12	-10	-7	-12	6	17	12
-6	-5	11	60	57	-6	-7	16	16	15	-6	-9	7	11	8	-7	-12	4	27	-23
-6	-5	10	11	-11	-6	-7	15	25	25	-6	-9	5	27	30	-7	-12	2	17	-15
-6	-5	9	51	49	-6	-7	14	17	-17	-6	-9	4	13	12	7	12	0	24	21
-6	-5	7	16	-12	-6	-7	13	22	-25	-6	-9	3	39	-37	7	11	6	26	-24
-6	-5	6	13	11	-6	-7	11	26	26	-6	-9	1	21	-25	7	11	1	11	7
-6	-5	5	119	-102	-6	-7	9	22	19	6	9	1	18	16	7	11	1	8	23
-6	-5	4	8	-10	-6	-7	8	15	15	6	9	2	12	-17	-5	-11	1	16	-15
-6	-5	3	36	35	-6	-7	7	21	-19	6	9	3	24	20	14	-11	3	21	14
-6	-5	2	8	8	-6	-7	5	11	8	6	9	5	10	-11	-20	-11	5	45	-20
-6	-5	1	83	94	-6	-7	4	14	10	6	9	7	24	-27	-7	-11	9	12	11
6	5	0	11	14	-6	-7	3	22	-18	6	10	7	8	-8	-7	-11	11	22	35
6	5	1	16	-17	-6	-7	2	20	18	6	10	3	25	26	-24	-11	13	31	-21
6	5	3	17	-17	-6	-7	1	18	22	6	10	0	11	11	22	-11	17	16	-13
6	5	5	26	22	6	7	0	18	18	-6	-10	4	32	-37	-7	-10	17	12	11
6	5	7	19	19	6	7	1	16	-11	-6	-10	6	21	16	-9	-10	16	18	24
6	5	9	17	-19	6	7	3	17	17	-6	-10	8	40	45	-7	-10	10	16	-28
6	5	11	17	-17	6	8	8	24	-23	-6	-10	11	7	-9	-7	-10	8	12	-16
6	6	8	15	-12	6	8	6	27	25	-6	-10	12	12	-14	-7	-10	7	14	3
6	6	6	13	13	6	8	4	11	13	-6	-10	14	46	-39	-7	-10	6	40	-14
6	6	4	29	29	6	8	3	11	14	-6	-10	15	16	13	-7	-10	4	14	34
6	6	3	15	-14	6	8	0	38	-42	-6	-10	16	25	22	-7	-10	0	38	-11
6	6	2	12	-15	-6	-8	2	18	14	-6	-10	20	22	-18	7	10	2	28	-38
6	6	0	43	-45	-6	-8	4	33	35	-6	-10	21	8	-7	7	9	6	12	21
-6	-6	2	22	-21	-6	-8	6	15	-17	-6	-11	19	14	16	7	9	1	28	9
-6	-6	4	67	66	-6	-8	8	20	-17	-6	-11	13	15	-21	7	9	0	9	28
-6	-6	6	58	-58	-6	-8	9	18	-20	-6	-11	12	20	17	-7	-9	1	17	-15
-6	-6	8	13	-10	-6	-8	12	48	45	-6	-11	9	47	44	-7	-9	2	14	9
-6	-6	9	10	12	-6	-8	13	16	13	-6	-11	8	12	9	-7	-9	3	28	-28
-6	-6	12	54	51	-6	-8	14	36	-33	-6	-11	7	40	-34	-7	-9	5	55	55
-6	-6	14	26	-25	-6	-8	18	20	19	-6	-11	5	29	-25	-7	-9	7	21	-17
-6	-6	16	16	-18	-6	-9	17	47	-45	-6	-11	3	16	13	-7	-9	8	8	-7
-6	-6	17	21	-22	-6	-9	15	26	22	-6	-11	1	23	21	-7	-9	9	14	-18
-6	-6	18	21	19	-6	-9	14	14	-9	6	11	3	14	-12	-7	-9	11	25	-26
-6	-6	22	11	10	-6	-9	13	54	48	-6	-12	8	12	-13	-7	-9	12	8	4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

HEXA HOST SQUALENE QUEST

PAGE 17

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	-9	13	50	42	-7	-6	8	71	68	7	4	2	62	60	-7	1	1	87	-18
-7	-9	15	17	13	-7	-6	7	12	13	7	4	4	25	-25	-7	1	2	6	39
-7	-9	17	47	-42	-7	-5	5	18	16	7	4	9	8	-12	-7	1	3	32	20
-7	-9	21	12	11	-7	-5	4	20	-24	7	3	7	28	-28	-7	1	5	48	13
-7	-8	20	14	12	-7	-5	2	12	-15	7	3	3	54	58	-7	1	10	25	-29
-7	-8	18	23	18	-7	-6	1	14	11	7	3	2	12	9	-7	1	11	33	-10
-7	-8	16	18	-16	7	6	2	18	16	7	3	1	25	-24	-7	1	12	25	11
-7	-8	14	43	-41	7	5	4	11	-12	7	3	0	14	-13	-7	1	13	31	-40
-7	-8	13	11	10	7	5	1	11	18	-7	3	1	20	-22	-7	1	14	12	14
-7	-8	12	50	52	-7	-5	3	11	-10	-7	-3	1	19	-19	-7	1	15	16	37
-7	-8	11	14	-16	-7	-5	4	13	-13	-7	-3	2	19	-19	-7	1	17	19	93
-7	-8	10	12	15	-7	-5	5	43	30	-7	-3	5	130	110	-7	2	20	14	-17
-7	-8	8	21	-21	-7	-5	7	50	-50	-7	-3	6	44	4	-7	2	17	13	-42
-7	-8	6	29	-31	-7	-5	9	31	-28	-7	-3	8	31	29	-7	2	16	20	-18
-7	-8	4	42	42	-7	-5	11	23	24	-7	-3	9	84	-83	-7	2	14	13	-30
-7	-8	2	40	39	-7	-5	12	19	21	-7	-3	11	16	17	-7	2	13	41	22
7	8	0	75	-76	-7	-5	13	13	-11	-7	-3	13	49	46	-7	2	12	45	26
7	8	4	25	22	-7	-5	14	9	-12	-7	-3	16	13	13	-7	2	11	17	-22
7	7	4	20	-20	-7	-5	18	9	-12	-7	-3	17	25	-28	-7	2	9	29	18
7	7	3	23	-22	-7	-5	19	16	16	-7	-3	20	11	-10	-7	2	8	56	-11
7	7	0	13	14	-7	-5	21	14	-15	-7	-3	21	13	11	-7	2	7	31	-11
-7	-7	1	44	48	-7	-4	22	15	16	-7	-2	17	14	-14	-7	2	6	48	9
-7	-7	3	27	-28	-7	-4	21	17	-16	-7	-2	16	15	-17	-7	2	4	43	19
-7	-7	6	13	-10	-7	-4	20	22	-23	-7	-2	14	14	-14	-7	2	3	16	18
-7	-7	7	27	-27	-7	-4	16	17	21	-7	-2	13	18	15	-7	2	2	34	9
-7	-7	8	17	-15	-7	-4	14	23	19	-7	-2	12	29	31	-7	2	0	85	6
-7	-7	9	49	48	-7	-4	13	10	-10	-7	-2	8	26	-32	7	-2	4	29	19
-7	-7	10	10	12	-7	-4	12	34	-29	-7	-2	7	21	-17	7	-2	6	13	9
-7	-7	11	10	-9	-7	-4	10	49	-47	-7	-2	6	48	-48	7	-2	8	23	-19
-7	-7	13	33	-32	-7	-4	8	41	43	-7	-2	5	13	11	7	-2	10	34	28
-7	-7	14	21	-21	-7	-4	6	54	45	-7	-2	4	142	122	7	-2	12	12	12
-7	-7	15	31	31	-7	-4	4	14	45	-7	-2	3	36	-35	7	-3	13	12	12
-7	-7	19	9	10	-7	-4	3	17	16	-7	-2	2	15	-17	7	-3	12	9	-29
-7	-7	21	18	-17	-7	-4	2	21	-21	7	-2	0	29	-30	7	-3	7	36	13
-7	-6	11	13	-12	-7	-4	1	10	-21	7	-2	1	11	13	7	-3	6	10	8
-7	-6	10	59	-59	7	4	1	33	-31	-7	2	2	12	-13	7	-3	5	48	-49

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

HEXA HOST SQUALENE QUEST

PAGE 18

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
7	-3	3	47	45	-7	5	10	23	24	7	-9	11	13	16	-8	8	0	41	40
7	-3	2	15	17	-7	5	9	23	-23	7	-9	4	10	-10	-8	8	2	9	-15
7	-3	1	27	25	-7	6	8	28	-32	7	-9	3	34	24	-8	8	6	14	18
-7	3	1	48	-44	-7	5	7	22	29	7	-9	1	36	30	-8	8	12	12	-12
-7	3	3	35	-33	-7	5	5	14	18	-7	9	0	21	18	-8	7	6	13	-16
-7	3	4	14	11	-7	6	4	13	19	-7	9	1	14	-12	-8	7	5	19	-18
-7	3	5	15	20	-7	6	3	13	-17	-7	9	2	15	-16	-8	7	4	17	18
-7	3	7	86	88	-7	6	2	21	-21	-7	10	2	10	9	-8	7	3	17	19
-7	3	8	13	12	-7	5	0	18	21	-7	10	2	29	-22	-8	7	0	12	-11
-7	3	9	57	-61	7	-5	1	9	-14	7	-10	4	13	18	8	-7	1	10	-11
-7	3	10	26	-27	7	-6	2	11	-13	7	-10	6	19	-23	8	-7	3	48	40
-7	3	12	13	21	7	-5	4	40	38	7	-11	5	15	17	8	-6	10	16	14
-7	3	13	25	25	7	-5	6	15	13	7	-11	4	10	9	8	-6	7	12	-10
-7	3	14	15	20	7	-5	14	14	12	-7	11	1	18	-14	8	-6	4	22	-19
-7	3	15	15	14	7	-7	7	14	10	-7	12	6	13	11	8	-6	2	11	-9
-7	4	12	22	-24	7	-7	5	26	-26	-7	14	3	9	10	-8	6	0	19	20
-7	4	10	24	23	7	-7	3	12	-9	-8	13	3	13	11	-8	6	1	18	17
-7	4	9	9	-10	7	-7	2	10	9	8	-12	6	14	-11	-8	6	2	25	-28
-7	4	8	34	-32	-7	7	1	11	-8	-8	11	6	11	-10	-8	6	3	19	-22
-7	4	7	23	29	-7	7	3	39	40	-8	11	5	15	-15	-8	5	15	12	-8
-7	4	6	32	-34	-7	7	4	20	19	-8	11	3	19	21	-8	5	14	14	-12
-7	4	4	43	46	-7	7	5	23	-22	8	-11	1	10	-8	-8	5	13	29	-27
-7	4	3	30	-34	-7	7	6	13	-16	8	-11	3	13	-12	-8	5	12	15	16
-7	4	2	11	-18	-7	7	7	10	-4	8	-11	7	18	18	-8	5	9	16	14
7	-4	2	25	-24	-7	7	15	16	-17	8	-10	4	14	12	-8	5	5	29	-29
7	-4	4	53	52	-7	7	16	16	-16	-8	10	0	25	16	-8	5	4	15	18
7	-4	8	44	-44	-7	8	13	10	-9	-8	10	4	14	12	-8	5	1	28	29
7	-5	10	15	-13	-7	8	12	16	-13	-8	9	9	15	-12	8	-5	3	17	-20
7	-5	7	21	15	-7	8	8	14	12	-8	9	1	35	-32	8	-5	7	18	21
7	-5	5	26	-28	-7	8	5	12	-11	-8	9	0	8	13	8	-5	11	18	-21
-7	5	2	15	17	-7	8	4	36	-41	8	-9	1	16	-15	8	-4	8	14	-16
-7	5	6	40	-47	-7	8	3	12	11	8	-9	3	24	24	8	-4	6	10	8
-7	5	7	47	42	7	-8	1	14	-14	8	-9	4	15	-14	8	-4	4	49	51
-7	5	9	19	-24	7	-8	2	15	-12	8	-8	4	18	-13	8	-4	2	27	-29
-7	5	11	9	5	7	-8	5	9	-6	8	-8	3	13	15	-8	-4	4	37	40
-7	6	15	15	16	7	-8	8	13	15	8	-8	2	20	-18	-8	-4	5	10	6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8	2	5	12	11	-8	-1	20	11	10	-8	-3	5	41	48	-8	-9	18	36	-30
-8	2	6	48	-44	-8	-1	14	12	-10	-8	-3	4	22	-26	-8	-9	14	57	54
-8	2	7	26	-21	-8	-1	13	42	-43	-8	-3	3	20	-20	-8	-9	11	38	32
-8	2	8	38	34	-8	-1	12	18	18	-8	-3	2	14	-14	-8	-9	9	8	-4
-8	2	9	22	23	-8	-1	11	10	-13	-8	-3	1	43	43	-8	-9	6	54	-53
-8	2	10	42	-44	-8	-1	10	17	15	-8	3	0	22	-23	-8	-9	5	17	-14
-8	2	16	10	-12	-8	-1	9	50	51	-8	3	5	16	18	-8	-9	1	18	-18
-8	1	17	17	-16	-8	-1	8	17	-16	-8	3	7	14	-18	-8	-9	1	32	32
-8	1	11	14	17	-8	-1	7	18	18	-8	3	10	16	-17	8	9	3	21	24
-8	1	10	6	5	-8	-1	6	11	-10	-8	4	6	14	21	8	10	0	14	12
-8	1	6	11	9	-8	-1	5	23	-27	-8	4	1	14	-17	-8	10	1	38	-39
-8	1	5	76	72	-8	-1	3	59	-57	-8	4	0	21	-22	-8	10	2	8	-8
-8	1	3	41	-46	-8	-1	1	39	38	-8	-4	2	51	50	-8	10	3	22	22
-8	1	2	26	21	-8	1	1	30	26	-8	-4	3	13	13	-8	10	4	10	-10
-8	1	1	21	-17	-8	1	3	29	-27	-8	-4	4	27	-25	-8	10	6	17	-17
8	-1	3	48	49	8	1	7	23	21	-8	-4	12	11	-7	-8	10	8	14	-13
8	-1	7	24	-27	8	2	6	29	32	-8	-4	15	8	-7	-8	10	10	24	22
8	-1	8	14	-11	8	2	4	16	-18	-8	-5	18	8	-6	-8	10	14	20	-19
8	-1	9	41	42	8	2	2	24	-19	-8	-5	17	20	-21	-8	10	20	24	18
8	-1	11	10	-8	8	2	1	21	18	-8	-5	15	8	-11	-8	11	15	27	-25
8	0	8	21	24	-8	-2	2	66	64	-8	-5	13	24	29	-8	11	13	10	8
8	0	6	19	-19	-8	-2	4	17	17	-8	-5	11	34	28	-8	11	10	32	37
8	0	4	51	-53	-8	-2	6	46	-46	-8	-5	9	25	-21	-8	11	7	10	-14
8	0	2	37	39	-8	-2	8	20	17	-8	-5	7	45	-46	-8	11	3	43	-45
8	0	0	61	57	-8	-2	10	12	8	-8	-5	5	55	58	-8	11	1	26	-32
-8	0	1	8	8	-8	-2	12	34	33	-8	-5	3	21	21	8	11	5	47	41
-8	0	3	25	-23	-8	-2	13	21	23	-8	-5	2	13	12	-8	12	2	23	20
-8	0	4	72	-71	-8	-2	14	38	-40	-8	-5	1	37	-41	-8	12	8	19	-20
-8	0	5	30	-26	-8	-2	15	14	-12	-8	5	2	11	-12	-8	12	10	15	7
-8	0	6	39	41	-8	-3	21	8	7	-8	5	3	20	-12	-8	12	10	15	-40
-8	0	8	37	40	-8	-3	19	22	24	-8	5	4	7	25	-8	12	12	30	19
-8	0	10	30	-31	-8	-3	17	28	-27	-8	5	7	19	11	-8	12	14	27	-13
-8	0	11	23	-27	-8	-3	15	12	-12	-8	6	6	12	-23	-8	13	18	21	8
-8	0	16	11	9	-8	-3	13	26	-12	-8	6	4	22	-12	-8	13	17	25	26
-8	0	20	11	-11	-8	-3	8	9	28	-8	6	2	45	-21	-8	14	12	16	-12
-8	-1	21	16	-18	-8	-3	7	16	-21	-8	-6	2	32	48	-8	14	16	15	13

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8-15	11	16	-14	8	-9	-6	8	19	-20	-9	-4	2	53	56	-9	-1	8	10	-11
-8-15	7	19	16	-31	-9	-6	6	37	35	9	4	0	20	23	-9	-1	9	32	37
-8-15	5	10	-7	17	-9	-6	4	15	-18	9	4	2	41	-43	-9	-1	10	14	15
-8-16	10	24	25	28	-9	-6	3	12	13	9	4	4	10	11	-9	-1	11	33	-34
-9-15	7	23	22	14	-9	-6	2	16	-15	9	4	6	24	25	-9	-1	13	9	-12
-9-15	11	16	-16	-19	9	6	0	23	-20	9	4	10	21	-19	-9	-1	15	26	28
-9-15	13	8	-9	-16	9	6	2	12	12	9	3	9	9	9	-9	0	18	20	-17
-9-14	16	13	-11	16	9	6	3	10	-11	9	3	3	26	-27	-9	0	14	17	19
-9-14	14	11	14	-18	9	6	4	26	24	9	3	1	46	40	-9	0	13	12	13
-9-14	8	13	-10	-13	9	5	5	33	28	-9	-3	3	13	-11	-9	0	11	15	-13
-9-14	6	10	11	36	9	5	3	14	12	-9	-3	9	34	33	-9	0	10	41	-45
-9-14	2	15	-12	-16	9	5	2	14	-18	-9	-3	10	24	22	-9	0	9	14	12
-9-13	3	13	12	-20	9	5	1	26	-22	-9	-3	11	40	-39	-9	0	6	42	37
-9-13	9	11	-10	29	-9	-5	1	30	-28	-9	-3	13	12	-14	-9	0	5	23	-26
-9-13	17	8	7	32	-9	-5	3	45	50	-9	-3	17	28	31	-9	0	4	19	-16
-9-12	16	15	-13	-75	-9	-5	5	18	22	-9	-3	21	17	-17	9	0	0	33	-33
-9-12	14	20	23	-16	-9	-5	7	28	-30	-9	-2	16	34	34	9	0	2	35	32
-9-12	12	24	-25	10	-9	-5	9	11	-15	-9	-2	15	11	-12	9	0	4	15	16
-9-12	10	10	9	30	-9	-5	13	32	28	-9	-2	14	21	-17	9	0	6	20	-21
-9-12	2	16	-15	-19	-9	-5	14	17	18	-9	-2	13	8	10	9	-1	7	38	-35
9 12	0	14	21	-12	-9	-5	15	46	-46	-9	-2	11	13	-16	9	-1	5	49	47
9 12	2	14	-16	11	-9	-5	16	9	-11	-9	-2	8	25	22	9	-1	1	29	-34
9 11	1	8	7	23	9	7	3	14	14	-9	-2	6	12	15	-9	1	3	25	-26
-9-11	1	30	-28	-30	-9	-5	17	14	-15	-9	-2	5	13	-16	-9	1	4	9	9
-9-11	3	10	15	-38	-9	-5	18	14	-15	-9	-2	4	15	-13	-9	1	5	8	-6
-9-11	7	8	6	-38	-9	-5	19	19	22	-9	-2	3	15	-16	-9	1	6	66	67
-9-11	9	25	-23	67	-9	-4	22	22	-22	-9	-2	2	9	8	-9	1	7	12	18
-9-11	13	26	26	-24	-9	-4	21	9	11	-9	-2	1	25	-24	-9	1	8	47	-43
-9-11	15	30	-29	12	-9	-4	18	19	17	-9	-2	0	23	-25	-9	1	10	20	-18
-9-11	17	12	12	12	-9	-4	16	18	16	9	2	2	38	34	-9	1	12	7	-12
-9-10	16	11	15	-20	-9	-4	12	12	-12	9	1	5	12	13	-9	1	16	17	-21
-9-10	14	30	-33	17	-9	-4	10	68	69	9	1	3	7	10	-9	1	17	9	11
-9-10	10	23	24	-15	-9	-4	9	6	-7	9	1	1	11	12	-9	1	17	16	-16
-9-10	4	31	-30	12	-9	-4	7	14	10	-9	-1	1	14	-10	-9	1	18	12	17
9 10	0	10	10	17	-9	-4	6	34	-30	-9	-1	5	20	14	-9	2	17	12	-15
9 9	5	17	-15	-18	-9	-4	4	35	-33	-9	-1	7	17	12	-9	2	16	8	-9

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-9	2	14	15	-17	-9	12	1	10	11	10	-4	1	16	16	-10	0	8	43	-46
-9	2	13	31	34	-10	11	3	17	-17	-10	4	2	12	-10	-10	0	10	40	38
-9	2	12	47	49	-10	10	9	9	10	-10	4	6	18	19	-10	0	12	31	30
-9	2	8	22	23	-10	9	5	13	-14	-10	4	7	12	9	-10	0	14	18	-18
-9	2	7	14	-15	-10	9	1	17	18	-10	4	10	16	-20	-10	0	15	12	-9
-9	2	6	41	-44	10	-8	6	20	17	-10	3	15	21	21	-10	-1	19	14	14
-9	2	2	55	55	10	-8	2	15	-11	-10	3	14	13	-16	-10	-1	17	11	-11
-9	2	0	28	-29	-10	8	4	13	12	-10	3	11	16	-12	-10	-1	15	25	-23
9	-2	2	10	-9	-10	8	5	11	13	-10	3	10	14	12	-10	-1	14	11	9
9	-2	4	18	-20	-10	8	6	33	-35	-10	3	9	25	21	-10	-1	13	28	26
9	-2	6	58	60	-10	8	7	18	-19	-10	3	8	11	-10	-10	-1	9	17	-17
9	-3	11	12	-11	-10	7	11	15	19	-10	3	7	13	15	-10	-1	8	13	-16
9	-3	7	24	23	-10	7	10	9	-12	-10	3	5	17	-14	-10	-1	7	25	-24
9	-3	3	10	9	-10	7	7	22	-26	-10	3	3	34	-38	-10	-1	6	11	-12
9	-3	1	24	-24	-10	7	6	20	26	-10	3	1	22	25	-10	-1	5	23	25
-9	3	1	28	25	-10	7	5	28	31	10	-3	2	11	-9	-10	-1	3	19	18
-9	3	2	17	18	-10	7	4	18	-16	10	-3	9	17	19	10	1	5	20	18
-9	3	5	11	-14	-10	7	2	11	13	10	-2	4	27	-25	10	1	9	12	-9
-9	3	7	15	-18	-10	7	1	33	31	10	-2	1	8	11	10	2	8	9	-10
-9	3	13	28	-32	10	-7	1	25	-32	-10	2	0	12	-13	10	2	6	30	-26
-9	3	14	11	-12	10	-7	5	19	19	-10	2	2	38	34	10	2	4	33	35
-9	3	15	17	16	10	-6	3	12	-13	-10	2	3	11	11	10	2	2	17	17
-9	3	16	16	17	10	-6	2	42	41	-10	2	6	30	-29	10	2	0	20	-23
-9	4	17	8	-11	-10	6	0	39	-35	-10	2	10	26	26	-10	-2	4	8	12
-9	4	13	10	10	-10	6	1	20	-16	-10	2	12	11	7	-10	-2	6	52	54
-9	4	11	12	11	-10	6	2	13	20	-10	2	14	39	-35	-10	-2	7	28	27
-9	4	7	13	-14	-10	6	12	15	16	-10	2	15	19	-15	-10	-2	8	55	-58
-9	4	0	11	13	-10	5	7	13	-16	-10	1	15	16	-16	-10	-2	9	12	11
9	-4	2	15	-11	-10	5	5	18	16	-10	1	14	20	19	-10	-2	10	29	-29
9	-4	4	17	-12	10	5	1	23	-24	-10	1	9	12	10	-10	-2	12	43	46
9	-4	5	11	-14	10	-5	3	19	-16	-10	1	7	29	-30	-10	-2	14	24	22
9	-4	6	11	-13	10	-5	5	24	23	-10	1	6	15	12	-10	-2	16	26	-26
9	-4	8	15	16	10	-5	7	22	-24	10	-1	1	15	14	-10	-2	18	21	-21
9	-5	7	11	12	10	-4	6	23	-25	10	-1	3	20	-24	-10	-2	19	14	-15
9	-5	5	35	33	10	-4	4	16	14	10	-1	5	22	20	-10	-2	20	18	20
9	-5	3	27	-28	10	-4	2	24	22	-10	0	4	19	19	-10	-3	19	18	-19

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-10	-3	18	17	14	-10	-6	12	21	-22	-10	-12	11	11	9	-11	-8	4	29	27
-10	-3	15	17	13	-10	-6	13	9	-14	-10	-12	12	11	-15	-11	-7	4	13	13
-10	-3	13	23	20	-10	-6	15	15	-13	-10	-12	15	9	-4	-11	-7	5	10	-19
-10	-3	12	10	-13	-10	-6	16	12	8	-10	-13	13	13	-10	-11	-7	7	29	23
-10	-3	11	56	-56	-10	-7	21	11	10	-10	-13	11	19	23	-11	-7	9	27	-22
-10	-3	10	15	13	-10	-7	15	30	-31	-10	-13	7	16	-19	-11	-7	11	44	46
-10	-3	7	46	46	-10	-7	11	50	47	-10	-13	3	14	10	-11	-7	13	27	-25
-10	-3	5	15	-17	-10	-7	9	39	-37	-10	-14	10	19	-13	-11	-6	20	15	-12
10	3	0	12	-13	-10	-7	7	14	-10	-10	-14	12	17	15	-11	-6	18	22	22
10	3	1	41	43	-10	-7	5	20	-20	-11	-12	16	11	11	-11	-6	17	16	-14
10	3	5	26	-26	-10	-7	3	65	66	-11	-12	8	25	25	-11	-6	16	19	14
10	4	6	12	-13	10	7	1	28	-28	-11	-12	6	17	-15	-11	-6	12	56	-55
10	4	0	30	27	10	8	2	11	-7	-11	-12	4	9	-8	-11	-6	11	14	13
-10	-4	6	11	-9	10	8	0	25	16	-11	-11	3	16	-15	-11	-6	10	32	36
-10	-4	8	19	-17	-10	-8	2	19	-26	-11	-11	7	16	18	-11	-6	8	27	17
-10	-4	10	23	14	-10	-8	3	15	15	-11	-11	11	11	-15	-11	-6	6	16	-13
-10	-4	15	9	-10	-10	-8	10	23	-22	-11	-11	13	11	-5	-11	-6	4	23	-20
-10	-5	20	11	-8	-10	-8	12	22	24	-11	-11	15	21	23	-11	-6	3	11	-12
-10	-5	14	12	10	-10	-8	14	40	39	-11	-10	16	26	-24	-11	-6	2	26	18
-10	-5	13	18	18	-10	-8	16	35	-35	-11	-10	12	32	29	-11	-6	1	10	-14
-10	-5	11	25	-22	-10	-8	18	14	-11	-11	-10	8	22	-20	11	6	0	16	16
-10	-5	9	27	29	-10	-9	15	21	23	-11	-10	6	9	10	11	6	2	13	-12
-10	-5	7	22	-19	-10	-9	11	18	-18	-11	-10	4	12	12	11	5	1	22	24
-10	-5	6	18	24	-10	-9	7	10	8	11	10	0	12	-16	-11	-5	1	28	24
-10	-5	3	16	13	-10	-9	5	14	15	-11	-9	5	11	10	-11	-5	3	24	-25
10	5	1	27	25	-10	-9	3	18	-17	-11	-9	7	19	-20	-11	-5	5	16	12
10	5	3	15	-15	-10	-10	2	19	12	-11	-9	9	18	15	-11	-5	6	14	-15
10	5	5	13	-10	-10	-10	4	18	-16	-11	-9	11	16	15	-11	-5	7	49	44
10	5	7	14	15	-10	-11	15	17	12	-11	-9	13	26	-26	-11	-5	11	49	-48
10	6	4	15	-13	-10	-11	11	15	-11	-11	-8	18	14	14	-11	-5	12	14	-16
10	6	2	24	-23	-10	-11	7	21	21	-11	-8	16	12	-11	-11	-5	15	15	14
10	6	0	51	43	-10	-11	5	9	-6	-11	-8	15	13	12	-11	-5	16	12	9
-10	-6	4	44	-47	-10	-11	1	13	-13	-11	-8	9	16	11	-11	-4	19	18	-17
-10	-6	6	20	18	10	12	0	23	20	-11	-8	8	28	28	-11	-4	18	13	14
-10	-6	10	50	52	-10	-12	1	8	-12	-11	-8	6	44	-37	-11	-4	17	13	-12
-10	-6	11	20	18	-10	-12	6	18	-21	-11	-8	5	18	-16	-11	-4	14	10	-9

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-11	0	2	22	21	-11	5	1	32	-33	-12	3	15	15	-15	12	2	0	29	31	-12	-5	1	20	-21
11	0	0	17	14	-11	5	2	17	-18	-12	3	9	13	15	-12	-2	7	12	-14	-12	-6	4	24	18
11	0	2	17	-16	-11	5	3	33	33	-12	3	7	23	-21	-12	-2	8	26	24	-12	-6	6	21	-17
11	0	8	14	11	-11	5	5	14	13	-12	3	5	29	-28	-12	-2	10	15	-16	-12	-6	10	25	23
11	-1	5	15	-13	-11	5	6	8	9	-12	3	3	46	48	-12	-2	12	24	-26	-12	-6	12	19	-17
11	-1	3	12	-10	-11	5	7	23	-22	-12	3	2	10	-10	-12	-2	14	24	26	-12	-6	14	13	15
11	-1	1	26	27	-11	5	8	15	-13	12	-3	1	18	-19	-12	-2	16	15	-13	-12	-6	18	8	7
-11	1	3	24	-29	-11	5	14	13	13	12	-3	5	15	16	-12	-2	18	9	8	-12	-7	17	15	-13
-11	1	5	29	-28	-11	5	15	18	-16	12	-2	4	18	16	-12	-3	14	16	-14	-12	-7	15	10	10
-11	1	6	15	-15	-11	6	15	12	-14	-12	2	0	16	-15	-12	-3	13	20	-22	-12	-7	10	13	-13
-11	1	7	58	58	-11	6	4	27	-31	-12	2	4	32	32	-12	-3	12	11	11	-12	-7	9	31	-35
-11	1	11	36	-31	-11	6	5	14	14	-12	2	8	36	-36	-12	-3	11	44	46	-12	-7	7	38	36
-11	1	12	19	-20	-11	6	2	37	39	-12	2	9	13	-15	-12	-3	8	12	12	-12	-7	5	15	13
-11	1	13	18	19	-11	6	0	19	-17	-12	2	10	16	15	-12	-3	7	25	-24	-12	-7	3	35	-31
-11	2	16	10	11	11	-6	6	11	11	-12	2	12	13	12	-12	-3	3	13	13	12	8	0	12	12
-11	2	12	14	-15	-11	7	3	23	-23	-12	2	14	13	13	-12	-3	1	23	28	-12	-8	8	33	35
-11	2	10	11	-11	-11	7	5	17	18	-12	1	11	19	17	-12	3	1	26	-30	-12	-8	10	23	-24
-11	2	9	8	-11	-11	8	8	17	18	-12	1	9	18	-23	12	4	0	22	-21	-12	-9	13	18	-16
-11	2	6	41	41	11	-8	4	15	-17	-12	1	8	11	8	-12	-4	4	36	35	-12	-9	11	11	9
-11	2	4	26	-24	11	-10	2	13	15	-12	1	5	19	20	-12	-4	5	7	-2	-12	-9	9	27	27
-11	2	2	14	-16	-12	7	3	20	-19	-12	1	1	24	-24	-12	-4	6	11	-13	-12	-9	7	14	-14
11	-2	8	10	7	12	-7	1	24	24	12	-1	3	19	-16	-12	-4	8	19	-18	-12	-9	5	15	13
11	-3	1	20	19	-12	6	0	17	15	-12	0	2	16	-16	-12	-4	11	33	31	-12	-9	1	22	20
-11	3	1	12	-17	-12	6	2	20	22	-12	0	6	10	8	-12	-4	12	13	-11	-12	-10	4	14	-17
-11	3	3	18	-17	-12	6	3	13	15	-12	0	10	15	-8	-12	-4	14	14	-13	-12	-10	8	14	15
-11	3	7	19	20	-12	6	4	33	-30	-12	0	11	13	14	-12	-4	16	12	-13	-12	-10	12	9	7
-11	3	11	16	-20	-12	6	5	12	-16	-12	0	12	12	-13	-12	-4	19	11	-8	-12	-10	13	13	14
-11	3	13	14	10	-12	5	14	9	8	-12	0	14	12	12	-12	-4	20	11	13	-12	-10	16	13	-14
-11	4	14	19	17	-12	5	5	28	-26	-12	-1	16	11	-11	-12	-5	19	15	-13	-12	-11	17	18	-16
-11	4	8	27	-20	-12	5	4	9	8	-12	-1	15	26	-25	-12	-5	13	35	34	-12	-11	15	14	15
-11	4	7	13	13	-12	5	3	20	21	-12	-1	11	33	32	-12	-5	11	22	-25	-12	-11	5	17	10
-11	4	6	29	27	-12	5	2	17	-21	-12	-1	10	16	-15	-12	-5	10	8	7	-12	-13	13	19	17
-11	4	5	13	-14	12	-4	2	27	-29	-12	-1	9	14	-15	-12	-5	9	24	-23	-12	-13	9	18	-15
-11	4	2	20	-17	-12	4	0	13	12	-12	-1	8	11	11	-12	-5	7	23	20	-13	-12	10	14	15
11	-4	4	21	20	-12	4	2	21	15	-12	-1	3	16	17	-12	-5	5	30	30	-13	-11	5	16	-12
11	-5	1	16	16	-12	4	4	12	-15	12	2	4	12	-16	-12	-5	3	18	-14	-13	-11	9	20	17

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

HEXA HOST SQUALENE QUEST

PAGE 24

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-13	-9	9	13	14	-13	-3	11	15	16	-13	4	0	20	21
-13	-8	16	19	-17	-13	-3	13	38	-39	-14	-3	7	10	-8
-13	-8	16	23	21	-13	-3	14	17	-17	-14	-4	6	20	19
-13	-8	6	12	12	-13	-3	19	14	-17	-14	-4	10	21	-19
-13	-8	4	15	16	-13	-2	14	22	12	-14	-4	15	9	-10
-13	-7	8	14	10	-13	-2	12	17	20	-14	-4	16	21	20
-13	-7	12	9	-6	-13	-2	10	26	-18	-14	-4	17	10	9
-13	-7	17	21	-19	-13	-2	9	14	-25	-14	-4	18	18	-17
-13	-6	9	11	-12	-13	-2	8	27	13	-14	-5	17	21	18
-13	-6	8	17	-14	-13	-2	2	24	31	-14	-5	13	19	-18
-13	-6	7	15	-14	-13	-2	0	28	-25	-14	-5	11	11	-12
-13	-6	2	12	12	13	2	4	23	30	-14	-5	9	35	33
-13	-5	1	16	13	13	1	3	27	-22	-14	-5	7	13	-10
-13	-5	5	29	-23	13	-1	1	19	28	-14	-6	2	17	15
-13	-5	9	27	28	-13	-1	7	16	-20	-14	-6	8	14	-12
-13	-4	14	16	-18	-13	-1	9	15	16	-14	-6	12	15	17
-13	-4	13	14	17	-13	-1	1	11	15	-14	-6	13	16	17
-13	-4	12	20	22	-13	2	16	18	-12	-14	-6	14	15	-15
-13	-3	1	34	30	-13	3	1	16	15	-14	-6	14	13	11
-13	-3	3	22	-21	-13	3	5	20	-23	-14	-7	13	13	-15
-13	-3	5	13	-9	-13	4	12	11	-8	-14	-7	3	13	12
-13	-3	9	27	25	-13	4	2	23	-22	-14	-8	6	14	12
-13	-3				-13	4				-14	-9	13	9	10

END OF LISTING OF FILE :GACA17.PRINT(3,*,1) FOR USER GACA17 AT 1980/01/08__21:34:41

99

Crystal data

Acetic acid adduct of hexakis(R- α -phenylethylsulphonylmethyl) benzene, $C_{60}H_{66}S_6O_{12} \cdot 4(CH_3^cO_2H)$, $M_r = 1411.6$, monoclinic, $a = 16.319(5)$, $b = 13.869(4)$, $c = 16.731(5) \text{ \AA}$, $\beta = 106.47(3)^\circ$, $U = 3631.7 \text{ \AA}^3$, $D_c = 1.11$, $D_m = 1.12 \text{ Mg m}^{-3}$, $Z = 2$, $F(000) = 1492$, space group $P2_1^c$, $\mu(\text{Mo-K}\alpha) = 2.6 \text{ cm}^{-1}$.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID GUES

PAGE 1

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	0	22	7	5	-13	0	12	34	33	-7	0	8	36	28	-6	0	5	26	23	-7	0	2	104	86
-3	0	21	20	17	-14	0	12	15	14	-8	0	8	41	39	-5	0	5	34	27	-8	0	2	34	25
-6	0	20	15	16	-13	0	11	17	16	-9	0	8	10	8	-4	0	5	128	117	-9	0	2	40	33
-2	0	19	7	8	-12	0	11	48	46	-10	0	8	25	24	-3	0	5	68	63	-11	0	2	33	33
-4	0	18	17	15	-9	0	11	22	18	-12	0	8	20	21	-2	0	5	65	53	-12	0	2	20	16
-13	0	17	17	15	-8	0	11	17	14	-16	0	8	14	14	-1	0	5	123	119	-15	0	1	11	11
-1	0	16	17	15	-6	0	11	11	11	-14	0	7	17	15	-1	0	4	31	28	-14	0	1	12	10
-6	0	16	14	14	-3	0	11	16	18	-13	0	7	47	48	-2	0	4	41	40	-11	0	1	12	9
-16	0	16	14	12	-2	0	11	18	21	-10	0	7	11	11	-3	0	4	49	39	-10	0	1	34	33
-15	0	15	13	12	-1	0	10	12	13	-8	0	7	46	43	-4	0	4	75	63	-9	0	1	18	15
-13	0	15	10	7	-2	0	10	35	38	-7	0	7	33	27	-5	0	4	70	72	-8	0	1	67	56
-8	0	15	25	22	-3	0	10	12	11	-6	0	7	12	10	-6	0	4	31	33	-7	0	1	78	65
-6	0	15	30	32	-4	0	10	24	25	-5	0	7	56	44	-7	0	4	63	59	-6	0	1	48	56
-5	0	15	16	15	-5	0	10	11	8	-4	0	7	99	95	-8	0	4	9	10	-5	0	1	113	92
-4	0	15	21	21	-3	0	10	15	14	-3	0	7	86	94	-10	0	4	13	11	-3	0	1	39	35
-3	0	15	12	12	-8	0	10	23	24	-2	0	7	24	22	-11	0	4	11	10	-2	0	1	18	22
-2	0	15	33	33	-11	0	10	16	18	-1	0	7	13	13	-12	0	4	9	11	2	0	0	9	10
-3	0	14	15	14	-13	0	10	13	13	-1	0	6	64	55	-13	0	4	23	19	3	0	0	39	40
-4	0	14	15	18	-15	0	10	19	19	-2	0	6	38	28	-15	0	4	14	14	4	0	0	32	25
-5	0	14	10	8	-17	0	10	11	9	-3	0	6	28	23	-19	0	3	17	16	5	0	0	97	90
-6	0	14	14	13	-16	0	9	12	12	-4	0	6	36	36	-17	0	3	16	15	6	0	0	59	52
-9	0	14	19	18	-14	0	9	20	20	-5	0	6	66	67	-14	0	3	19	16	7	0	0	55	55
-10	0	14	15	13	-13	0	9	10	9	-7	0	6	42	45	-13	0	3	16	19	8	0	0	45	42
-12	0	14	13	11	-12	0	9	12	13	-9	0	6	22	19	-8	0	3	61	59	9	0	0	29	26
-14	0	14	9	9	-11	0	9	23	25	-10	0	6	55	57	-7	0	3	25	18	10	0	0	19	14
-11	0	13	20	21	-9	0	9	34	35	-12	0	6	17	16	-6	0	3	87	76	11	0	0	17	19
-8	0	13	42	42	-8	0	9	15	17	-14	0	6	10	9	-5	0	3	61	57	13	0	0	43	37
-6	0	13	14	15	-7	0	9	12	13	-16	0	6	12	14	-4	0	3	147	136	14	0	0	32	29
-4	0	13	26	27	-6	0	9	26	20	-19	0	5	13	14	-3	0	3	33	38	15	0	0	31	29
-3	0	13	16	16	-5	0	9	20	19	-15	0	5	45	46	-2	0	3	71	77	20	0	1	13	15
-1	0	13	12	13	-4	0	9	8	9	-14	0	5	13	12	-1	0	3	61	55	15	0	1	8	9
-1	0	12	20	21	-3	0	9	32	35	-12	0	5	15	15	-2	0	2	49	61	12	0	1	10	13
-4	0	12	16	16	-1	0	9	13	12	-11	0	5	22	22	-3	0	2	9	11	11	0	1	33	34
-7	0	12	11	8	-2	0	8	58	53	-10	0	5	38	39	-4	0	2	12	11	10	0	1	24	20
-8	0	12	13	12	-3	0	8	24	23	-8	0	5	29	33	-5	0	2	9	9	9	0	1	34	38
-10	0	12	25	24	-4	0	8	42	42	-7	0	5	22	19	-6	0	2	76	64	8	0	1	35	30

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID GUES

PAGE 2

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
7	0	1	31	24	6	0	4	35	36	3	0	8	14	11	11	2	0	14	8
6	0	1	27	24	8	0	4	11	9	7	0	8	42	39	2	0	15	8	11
5	0	1	98	88	9	0	4	10	11	9	0	8	20	18	1	0	15	15	12
4	0	1	54	50	10	0	4	59	57	11	0	8	23	24	0	0	15	19	17
3	0	1	12	9	11	0	4	10	10	16	0	9	16	14	3	0	16	11	14
1	0	1	60	68	16	0	4	18	18	10	0	9	18	19	6	0	17	7	6
0	0	2	57	61	15	0	5	26	26	7	0	9	28	26	2	0	17	16	17
1	0	2	29	27	9	0	5	10	8	6	0	9	23	24	1	0	18	14	9
2	0	2	52	49	8	0	5	16	14	4	0	9	23	17	2	0	19	13	12
3	0	2	29	30	7	0	5	19	21	2	0	9	43	41	1	0	19	11	8
4	0	2	96	97	6	0	5	13	13	0	0	9	15	13	1	1	19	11	8
6	0	2	28	25	5	0	5	14	14	0	0	10	31	32	1	1	18	7	7
7	0	2	43	41	4	0	5	67	54	1	0	10	31	31	3	1	17	15	10
8	0	2	32	32	3	0	5	43	32	5	0	10	13	10	3	1	16	11	10
9	0	2	12	14	2	0	5	46	33	6	0	10	17	16	1	1	15	7	15
10	0	2	52	53	1	0	5	71	64	11	0	10	16	16	5	1	14	22	21
12	0	2	30	26	0	0	5	154	148	13	0	10	14	14	4	1	14	21	14
13	0	2	23	22	1	0	6	85	72	15	0	10	12	13	3	1	15	19	18
14	0	2	23	17	2	0	6	34	37	6	0	11	21	13	2	1	14	19	39
17	0	2	9	10	3	0	6	107	95	5	0	11	21	21	1	1	14	37	21
14	0	3	15	14	4	0	6	21	21	3	0	11	48	47	0	0	14	21	12
13	0	3	29	32	5	0	6	28	31	1	0	11	36	34	1	1	13	14	21
12	0	3	15	16	6	0	6	10	10	0	0	11	23	21	2	2	13	20	17
11	0	3	22	22	7	0	6	7	8	2	0	12	24	26	3	3	13	14	14
9	0	3	46	39	9	0	6	31	31	6	0	12	13	12	5	5	13	15	14
8	0	3	24	24	10	0	6	29	28	7	0	12	13	10	3	6	13	15	14
7	0	3	50	44	12	0	6	17	18	8	0	12	15	14	6	7	13	12	17
3	0	3	160	148	19	0	7	10	11	10	0	13	23	24	6	6	12	16	17
2	0	3	117	108	12	0	7	28	25	7	0	13	25	22	5	5	12	15	14
1	0	3	28	25	5	0	7	31	29	3	0	13	18	20	3	3	12	13	13
0	0	4	136	137	2	0	7	101	92	1	0	13	19	17	2	2	12	13	12
1	0	4	15	19	1	0	7	35	37	0	0	14	20	21	3	3	12	15	12
2	0	4	180	150	0	0	7	36	39	1	0	14	31	33	1	1	12	16	15
3	0	4	42	36	0	0	8	53	51	2	0	14	28	29	0	0	12	26	27
4	0	4	50	52	1	0	8	24	18	3	0	14	15	15	5	5	11	41	39
5	0	4	45	43	2	0	8	55	47	4	0	14	21	15	2	2	11	14	41

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID GUES

PAGE 3

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
9	1	7	29	29	1	1	4	115	104	7	1	1	12	15	-18	1	2	13	13
10	1	7	16	17	0	1	4	75	70	8	1	1	26	22	-14	1	2	21	19
15	1	6	14	14	0	1	3	27	19	9	1	1	10	11	-13	1	2	31	29
13	1	6	13	12	1	1	3	35	41	10	1	1	27	25	-11	1	2	37	33
12	1	6	20	20	2	1	3	201	179	11	1	1	26	24	-10	1	2	27	25
10	1	6	19	19	3	1	3	42	36	12	1	1	38	39	-9	1	2	46	38
7	1	6	22	22	4	1	3	31	28	13	1	1	25	25	-8	1	2	44	43
6	1	6	19	17	5	1	3	21	20	17	1	1	12	10	-7	1	2	51	48
5	1	6	28	30	6	1	3	59	53	19	1	1	16	17	-6	1	2	35	38
4	1	6	35	30	7	1	3	24	25	20	1	1	11	11	-5	1	2	67	62
2	1	6	41	34	9	1	3	10	12	14	1	1	22	20	-4	1	2	95	85
1	1	6	31	31	11	1	3	24	21	13	1	1	16	19	-3	1	2	105	121
0	1	6	34	29	12	1	3	17	20	12	1	1	12	15	-2	1	2	41	40
0	1	5	69	63	13	1	3	31	33	11	1	1	20	18	-1	1	2	69	76
1	1	5	53	49	17	1	3	13	11	10	1	1	14	14	-1	1	3	102	112
2	1	5	53	48	17	1	2	11	13	9	1	1	27	23	-2	1	3	96	101
3	1	5	67	50	14	1	2	18	15	8	1	1	13	13	-3	1	3	53	48
4	1	5	43	44	13	1	2	27	28	7	1	1	79	72	-4	1	3	25	23
5	1	5	55	57	12	1	2	13	10	6	1	1	37	30	-5	1	3	79	75
6	1	5	11	11	11	1	2	31	29	5	1	1	51	49	-6	1	3	53	53
7	1	5	15	15	9	1	2	33	36	4	1	1	101	102	-7	1	3	41	43
8	1	5	27	21	8	1	2	49	45	3	1	1	61	61	-8	1	3	38	46
12	1	5	20	20	7	1	2	45	41	2	1	1	103	110	-10	1	3	15	12
13	1	5	16	16	6	1	2	43	41	-2	1	1	150	161	-11	1	3	11	12
16	1	5	18	17	5	1	2	66	52	-3	1	1	148	131	-12	1	3	16	16
18	1	4	11	10	4	1	2	77	66	-4	1	1	57	58	-13	1	3	11	11
13	1	4	19	16	3	1	2	79	72	-5	1	1	48	50	-14	1	3	19	18
12	1	4	10	7	2	1	2	140	145	-6	1	1	54	49	-16	1	3	10	10
11	1	4	25	26	1	1	2	66	66	-7	1	1	18	23	-17	1	3	15	13
10	1	4	14	14	0	1	2	11	11	-8	1	1	20	16	-19	1	3	8	7
8	1	4	30	31	1	1	1	58	65	-9	1	1	45	43	-19	1	4	15	15
6	1	4	31	37	2	1	1	128	134	-10	1	1	19	20	-15	1	4	28	26
5	1	4	55	51	3	1	1	104	90	-11	1	1	46	46	-14	1	4	16	15
4	1	4	47	44	4	1	1	109	100	-13	1	1	19	20	-13	1	4	18	18
3	1	4	58	53	5	1	1	92	74	-14	1	1	9	7	-13	1	4	18	18
2	1	4	71	56	6	1	1	58	49	-15	1	1	13	12	-12	1	4	29	30

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID

GUES

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	1	6	12	10	-5	1	9	44	43	-10	1	12	12	12	-9	1	16	9	9
-5	1	6	32	28	-7	1	9	30	28	-6	1	12	32	32	-8	1	16	15	15
-4	1	6	24	29	-8	1	9	25	24	-5	1	12	19	21	-7	1	16	14	15
-3	1	6	64	65	-9	1	9	17	17	-3	1	12	16	16	-5	1	16	14	15
-2	1	6	66	61	-10	1	9	19	22	-2	1	12	22	21	-2	1	16	19	20
-1	1	6	67	61	-11	1	9	33	37	-1	1	12	15	14	-9	1	17	10	9
-1	1	7	46	49	-12	1	9	9	8	-1	1	13	26	24	-12	1	17	16	15
-2	1	7	29	35	-14	1	9	14	16	-2	1	13	16	19	-8	1	18	6	4
-3	1	7	49	43	-14	1	10	26	26	-3	1	13	16	17	-3	1	19	7	9
-4	1	7	68	59	-13	1	10	11	11	-4	1	13	20	22	-2	1	21	16	14
-5	1	7	58	55	-12	1	10	11	10	-6	1	13	21	19	-11	2	18	13	12
-6	1	7	80	73	-11	1	10	26	25	-7	1	13	14	16	-5	2	17	18	17
-7	1	7	27	21	-10	1	10	20	19	-8	1	13	8	10	-2	2	16	12	12
-8	1	7	18	21	-9	1	10	19	22	-9	1	13	19	19	-5	2	16	12	13
-9	1	7	17	17	-8	1	10	10	9	-10	1	13	12	11	-7	2	16	14	13
-10	1	7	16	19	-7	1	10	21	21	-11	1	13	13	12	-9	2	16	16	16
-11	1	7	12	12	-6	1	10	29	31	-12	1	13	21	19	-10	2	16	12	14
-13	1	7	25	25	-5	1	10	8	10	-13	1	13	10	11	-15	2	15	13	12
-14	1	7	10	11	-4	1	10	13	13	-16	1	13	7	9	-14	2	15	12	13
-16	1	8	15	14	-3	1	10	14	16	-19	1	14	14	14	-12	2	15	9	10
-15	1	8	10	9	-2	1	10	32	35	-12	1	14	13	17	-8	2	15	12	11
-14	1	8	10	9	-1	1	10	7	7	-11	1	14	18	17	-7	2	15	27	26
-13	1	8	11	10	-1	1	11	9	10	-8	1	14	17	17	-6	2	15	13	15
-12	1	8	16	17	-2	1	11	29	33	-6	1	14	27	33	-3	2	15	17	15
-10	1	8	25	25	-3	1	11	33	34	-4	1	14	37	35	-1	2	15	13	14
-9	1	8	45	46	-5	1	11	12	11	-3	1	14	10	12	-1	2	14	14	15
-8	1	8	14	15	-7	1	11	15	15	-2	1	14	9	9	-5	2	14	10	9
-7	1	8	23	20	-10	1	11	24	23	-1	1	14	14	14	-6	2	14	11	11
-6	1	8	24	23	-11	1	11	34	35	-2	1	15	16	18	-7	2	14	12	10
-4	1	8	55	50	-13	1	11	21	20	-3	1	15	12	13	-10	2	14	8	8
-3	1	8	16	17	-14	1	11	8	9	-6	1	15	23	22	-11	2	14	10	11
-2	1	8	47	47	-15	1	11	16	16	-7	1	15	19	21	-12	2	14	20	17
-1	1	8	30	26	-19	1	12	9	10	-8	1	15	11	11	-13	2	14	9	10
-2	1	9	21	19	-15	1	12	7	5	-10	1	15	14	14	-15	2	13	14	11
-3	1	9	18	20	-12	1	12	32	33	-11	1	15	12	11	-12	2	13	13	13
-4	1	9	22	30	-11	1	12	16	13	-14	1	16	6	8	-11	2	13	20	19

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID GUES

PAGE 5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-12	2	10	14	11	-9	2	7	17	16	-2	2	4	27	35	-19	2	2	8	10
-13	2	10	16	13	-8	2	7	15	14	-3	2	4	42	38	-16	2	1	16	16
-14	2	10	13	12	-7	2	7	43	42	-4	2	4	27	31	-12	2	1	13	15
-16	2	9	12	10	-6	2	7	13	15	-5	2	4	32	37	-11	2	1	24	21
-14	2	9	7	7	-5	2	7	49	45	-7	2	4	42	39	-10	2	2	26	30
-13	2	9	14	15	-4	2	7	39	36	-8	2	4	19	23	-9	2	2	27	26
-12	2	9	38	41	-3	2	7	34	33	-10	2	4	26	25	-8	2	2	40	34
-11	2	9	24	23	-2	2	7	58	56	-11	2	4	25	25	-7	2	1	39	39
-10	2	9	26	25	-1	2	6	9	7	-12	2	4	42	42	-6	2	1	48	47
-9	2	9	22	19	-2	2	6	107	107	-13	2	4	28	26	-5	2	2	74	73
-7	2	9	24	25	-3	2	6	66	61	-17	2	4	14	15	-4	2	1	37	43
-6	2	9	26	27	-4	2	6	33	34	-17	2	3	9	10	-3	2	1	106	112
-5	2	9	21	18	-5	2	6	43	48	-16	2	3	15	16	-2	2	1	147	141
-4	2	9	24	29	-6	2	6	26	29	-14	2	3	16	15	-1	2	1	29	32
-1	2	9	19	16	-7	2	6	33	32	-12	2	3	25	23	1	2	0	99	107
-1	2	8	55	56	-8	2	6	13	15	-11	2	3	26	26	2	2	0	108	107
-2	2	8	55	54	-9	2	6	28	29	-10	2	3	16	13	3	2	0	133	131
-3	2	8	62	56	-10	2	6	33	34	-8	2	3	12	11	5	2	0	58	52
-4	2	8	19	20	-11	2	6	22	23	-6	2	3	41	46	6	2	0	64	48
-5	2	8	56	53	-12	2	6	12	11	-5	2	3	36	31	7	2	0	32	30
-6	2	8	14	13	-13	2	6	15	18	-4	2	3	33	42	8	2	0	53	45
-7	2	8	34	30	-14	2	6	17	20	-3	2	3	67	62	9	2	0	29	25
-8	2	8	18	21	-17	2	6	9	10	-2	2	3	65	75	10	2	0	47	44
-9	2	8	13	14	-15	2	5	13	13	-1	2	3	212	218	12	2	0	30	31
-10	2	8	13	13	-14	2	5	8	9	-1	2	2	133	129	13	2	0	26	24
-11	2	8	53	57	-12	2	5	41	41	-2	2	2	46	41	14	2	0	18	16
-12	2	8	25	27	-10	2	5	38	25	-3	2	2	106	106	13	2	1	15	15
-15	2	8	17	16	-9	2	5	25	29	-4	2	2	72	69	12	2	1	32	32
-16	2	8	16	17	-8	2	5	26	29	-5	2	2	52	48	11	2	1	35	34
-17	2	8	14	13	-7	2	5	71	68	-6	2	2	101	93	10	2	2	19	16
-16	2	7	17	18	-5	2	5	21	18	-7	2	2	97	94	9	2	2	31	30
-15	2	7	11	11	-4	2	5	8	9	-8	2	2	49	50	8	2	2	41	35
-14	2	7	19	19	-3	2	5	57	65	-9	2	2	9	8	7	2	2	22	22
-13	2	7	9	10	-2	2	5	37	41	-10	2	2	42	43	6	2	2	8	7
-12	2	7	17	16	-1	2	5	37	38	-14	2	2	34	30	5	2	2	8	10
-10	2	7	11	11	-1	2	4	49	46	-17	2	2	12	13	4	2	2	38	29

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID

GUES

PAGE 6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	2	4	102	95	8	2	7	13	13	9	2	10	8	9	3	3	9	14	15
4	2	4	48	46	6	2	7	18	21	16	2	11	14	16	4	3	9	9	8
5	2	4	15	13	5	2	7	23	24	9	2	11	10	9	5	3	9	12	10
6	2	4	42	37	4	2	7	31	31	16	2	11	17	16	6	3	9	10	8
8	2	4	17	17	3	2	7	48	45	23	2	11	22	23	8	3	9	12	12
9	2	4	36	35	2	2	7	46	39	23	2	11	23	23	7	3	9	22	22
12	2	4	12	14	1	2	7	47	42	22	2	11	23	22	9	3	9	13	14
13	2	4	11	11	0	2	7	39	39	21	2	11	20	21	11	3	9	21	21
12	2	5	26	27	0	2	8	12	11	32	2	11	31	32	14	3	8	12	12
10	2	5	10	11	1	2	8	45	39	11	2	11	14	11	12	3	8	20	21
8	2	5	43	40	2	2	8	68	63	15	2	12	15	15	6	3	8	11	11
7	2	5	44	44	3	2	8	26	26	17	2	12	18	17	5	3	8	12	12
5	2	5	42	44	4	2	8	40	41	10	2	12	12	10	10	3	8	13	13
4	2	5	43	41	8	2	8	12	12	20	2	12	21	10	10	3	8	13	16
3	2	5	58	57	9	2	8	8	9	14	2	12	17	14	6	3	8	21	19
2	2	5	11	14	10	2	8	16	15	10	2	12	10	10	5	3	7	14	14
1	2	5	20	20	13	2	8	7	8	13	2	12	11	13	1	3	7	22	21
0	2	5	25	20	14	2	8	15	17	14	2	12	13	14	2	3	7	19	20
0	2	6	28	28	16	2	8	12	10	13	2	13	13	26	3	3	7	40	40
1	2	6	30	33	9	2	9	21	22	18	2	13	20	18	1	3	7	28	26
2	2	6	65	63	8	2	9	17	17	27	2	13	24	27	2	3	7	19	31
3	2	6	18	15	5	2	9	16	14	24	2	13	23	24	3	3	7	23	13
4	2	6	56	57	4	2	9	33	30	15	2	14	15	15	6	3	7	22	24
5	2	6	10	13	3	2	9	43	40	18	2	14	18	18	9	3	7	10	14
6	2	6	10	9	13	2	9	13	13	18	2	14	16	18	10	3	7	11	12
7	2	6	20	21	21	2	9	11	11	16	2	14	18	16	16	3	7	34	34
8	2	6	21	21	1	2	9	11	12	13	2	14	13	13	17	3	7	15	15
9	2	6	20	20	0	2	9	15	17	12	2	15	12	12	12	3	6	13	13
10	2	6	15	14	1	2	10	36	36	16	2	15	18	16	10	3	6	22	23
11	2	6	12	12	2	2	10	18	16	13	2	15	15	13	8	3	6	25	24
12	2	6	20	20	3	2	10	19	20	11	2	15	15	11	7	3	6	16	15
13	2	6	18	20	4	2	10	19	16	13	2	15	12	11	6	3	6	11	11
13	2	7	11	11	5	2	10	16	17	7	2	16	8	7	6	3	6	14	15
12	2	7	13	13	6	2	10	19	17	17	2	16	17	17	5	3	6	14	16
11	2	7	15	17	7	2	10	14	15	12	2	16	12	12	3	3	6	41	39
9	2	7	28	30	8	2	10	33	33	10	2	17	11	10	2	3	6	17	16

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CHIRAL HEXA-HOST ACETIC ACID GUES

PAGE 7

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	3	6	37	35	6	3	3	34	35	12	3	1	32	32	-14	3	2	27	28
0	3	6	47	44	8	3	3	53	45	13	3	1	22	20	-13	3	2	20	19
0	3	5	25	22	9	3	3	30	28	14	3	1	13	11	-12	3	2	16	16
1	3	5	24	30	10	3	3	35	31	16	3	1	13	13	-11	3	2	13	11
3	3	5	17	15	11	3	3	31	29	17	3	1	9	10	-10	3	2	17	15
4	3	5	29	33	12	3	3	34	34	15	3	0	13	11	-9	3	2	27	22
5	3	5	27	28	13	3	3	13	15	14	3	0	20	21	-8	3	2	20	20
6	3	5	36	39	14	3	3	17	15	13	3	0	12	11	-7	3	2	37	35
7	3	5	30	33	17	3	3	13	10	11	3	0	22	23	-6	3	2	31	26
8	3	5	34	32	16	3	2	7	9	10	3	0	13	12	-5	3	2	39	37
9	3	5	22	19	14	3	2	13	10	9	3	0	26	23	-4	3	2	38	33
10	3	5	26	25	13	3	2	17	16	8	3	0	48	48	-3	3	2	114	113
11	3	5	14	11	12	3	2	20	16	7	3	0	60	57	-2	3	2	62	73
12	3	5	17	18	11	3	2	17	18	6	3	0	53	39	-1	3	2	107	104
13	3	5	17	15	10	3	2	40	39	5	3	0	50	47	-1	3	3	159	161
18	3	4	8	10	9	3	2	26	22	4	3	0	34	33	-2	3	3	93	101
16	3	4	9	9	8	3	2	9	10	3	3	0	70	85	-3	3	3	36	35
12	3	4	10	11	7	3	2	21	23	2	3	0	47	35	-4	3	3	19	22
11	3	4	33	33	6	3	2	48	45	1	3	0	15	16	-5	3	3	25	18
10	3	4	22	20	4	3	2	19	16	-1	3	1	28	34	-6	3	3	16	16
9	3	4	42	39	3	3	2	18	14	-2	3	1	22	21	-7	3	3	34	28
8	3	4	31	32	2	3	2	38	33	-3	3	1	166	161	-8	3	3	20	21
7	3	4	46	41	1	3	2	205	215	-4	3	1	43	39	-9	3	3	38	36
6	3	4	9	11	0	3	2	49	55	-5	3	1	44	36	-10	3	3	22	22
5	3	4	15	17	0	3	2	57	42	-6	3	1	36	34	-11	3	3	16	16
4	3	4	48	49	1	3	2	92	96	-7	3	1	26	21	-12	3	3	27	25
3	3	4	69	61	2	3	2	117	124	-8	3	1	48	48	-13	3	3	15	14
2	3	4	80	74	3	3	2	32	26	-9	3	1	11	13	-14	3	3	18	16
1	3	4	47	48	4	3	2	22	24	-10	3	1	30	31	-15	3	3	18	18
0	3	4	26	23	5	3	2	33	32	-11	3	1	18	19	-17	3	3	11	11
0	3	4	94	100	6	3	2	49	48	-12	3	1	14	14	-18	3	3	7	5
1	3	3	26	24	7	3	2	26	25	-13	3	1	10	11	-16	3	4	12	15
2	3	3	34	32	8	3	2	60	53	-14	3	1	9	11	-14	3	4	11	12
3	3	3	38	37	9	3	2	20	19	-16	3	1	9	7	-13	3	4	13	12
4	3	3	38	36	10	3	2	35	34	-18	3	1	12	12	-12	3	4	34	33
5	3	3	47	46	11	3	2	19	17	-19	3	2	12	13	-11	3	4	28	27

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										CHIRAL HEXA-HOST				ACETIC ACID GUES				PAGE						
H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC					
-1	3	6	13	18	-19	3	9	6	3	-2	3	13	13	10	-7	4	17	9	7	-10	4	11	36	36
-1	3	7	37	29	-20	3	10	7	6	-3	3	13	24	23	-3	4	16	18	16	-9	4	11	24	24
-2	3	7	29	26	-14	3	10	19	22	-5	3	13	6	7	-4	4	16	10	10	-8	4	11	12	13
-3	3	7	25	25	-12	3	10	18	16	-6	3	13	10	10	-10	4	16	15	15	-7	4	11	17	17
-4	3	7	23	22	-11	3	10	19	19	-9	3	13	21	20	-10	4	15	6	6	-6	4	11	16	15
-6	3	7	37	35	-10	3	10	11	11	-11	3	13	13	14	-7	4	15	14	13	-5	4	11	24	25
-7	3	7	14	17	-9	3	10	35	38	-16	3	13	15	13	-5	4	15	11	9	-4	4	11	19	21
-8	3	7	32	30	-8	3	10	18	19	-16	3	14	12	12	-4	4	15	17	18	-3	4	11	40	38
-9	3	7	34	34	-7	3	10	32	29	-11	3	14	18	18	-3	4	15	14	13	-2	4	11	16	18
-12	3	7	13	12	-6	3	10	28	28	-10	3	14	11	11	-2	4	15	15	17	-1	4	11	19	18
-13	3	7	24	22	-5	3	10	21	20	-8	3	14	17	19	-1	4	14	16	15	-2	4	10	12	13
-14	3	7	16	16	-4	3	10	21	22	-7	3	14	20	20	-2	4	14	14	14	-3	4	10	45	46
-16	3	8	17	16	-3	3	10	13	14	-4	3	14	18	21	-3	4	14	28	28	-4	4	10	30	29
-15	3	8	13	12	-2	3	10	28	29	-3	3	14	15	16	-4	4	14	12	12	-8	4	10	40	38
-12	3	8	17	17	-1	3	10	24	26	-1	3	14	27	25	-5	4	14	17	17	-10	4	10	25	28
-11	3	8	24	23	-1	3	11	21	22	-2	3	15	16	17	-8	4	14	12	13	-11	4	10	11	12
-9	3	8	15	14	-2	3	11	16	13	-5	3	15	16	15	-9	4	14	21	21	-14	4	10	12	11
-8	3	8	13	14	-3	3	11	30	27	-6	3	15	17	20	-9	4	13	20	20	-15	4	10	16	15
-7	3	8	14	14	-4	3	11	21	23	-8	3	15	9	10	-8	4	13	34	36	-13	4	9	12	13
-6	3	8	36	34	-5	3	11	35	32	-11	3	15	14	14	-7	4	13	17	20	-12	4	9	13	13
-5	3	8	18	18	-7	3	11	11	11	-10	3	16	10	10	-6	4	13	6	7	-11	4	9	19	17
-4	3	8	30	32	-8	3	11	21	21	-10	3	16	13	13	-6	4	13	21	24	-10	4	9	12	12
-3	3	8	15	12	-9	3	11	31	33	-5	3	16	10	11	-4	4	13	29	28	-8	4	9	16	17
-1	3	8	16	20	-10	3	11	31	30	-3	3	16	10	10	-3	4	13	17	19	-7	4	9	18	19
-1	3	9	47	48	-11	3	11	18	18	-2	3	16	16	13	-1	4	12	23	25	-6	4	9	20	18
-2	3	9	31	30	-14	3	12	14	13	-6	3	17	9	9	-3	4	12	22	22	-5	4	9	51	54
-4	3	9	31	29	-13	3	12	10	10	-9	3	17	13	14	-4	4	12	29	27	-4	4	9	33	25
-5	3	9	25	23	-11	3	12	9	8	-14	3	17	10	9	-5	4	12	21	20	-3	4	9	54	54
-6	3	9	43	44	-10	3	12	23	23	-9	3	18	12	9	-7	4	12	13	14	-1	4	9	26	22
-7	3	9	42	42	-9	3	12	17	17	-7	3	18	12	11	-10	4	12	12	11	-1	4	8	20	18
-9	3	9	17	17	-8	3	12	19	16	-12	4	12	13	12	-12	4	12	13	14	-2	4	8	21	17
-10	3	9	9	11	-6	3	12	17	18	-13	4	12	19	19	-13	4	12	19	19	-3	4	8	29	30
-11	3	9	31	29	-5	3	12	43	44	-8	4	18	18	19	-14	4	12	13	13	-4	4	8	15	16
-12	3	9	25	25	-4	3	12	21	21	-17	4	17	7	7	-18	4	11	10	11	-5	4	8	28	26
-14	3	9	14	14	-1	3	12	19	16	-13	4	17	15	14	-16	4	11	8	8	-6	4	8	18	17
-16	3	9	11	10	-1	3	13	31	33	-8	4	17	11	11	-13	4	11	8	7	-7	4	8	14	12

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8	4	8	31	31	-5	4	5	50	50	-10	4	2	33	31	10	4	1	19	21
-9	4	8	29	26	-3	4	5	11	16	-11	4	2	37	38	9	4	1	10	9
-12	4	8	13	14	-2	4	5	35	34	-12	4	2	20	21	8	4	1	20	19
-13	4	8	17	17	-1	4	5	38	37	-13	4	2	23	21	7	4	1	17	18
-13	4	7	35	37	-1	4	4	34	34	-19	4	2	7	7	6	4	1	38	38
-11	4	7	16	18	-2	4	4	27	24	-16	4	1	15	17	5	4	1	63	66
-10	4	7	46	47	-3	4	4	52	57	-15	4	1	14	13	4	4	1	42	37
-9	4	7	13	13	-4	4	4	31	27	-13	4	1	19	19	3	4	1	54	50
-8	4	7	35	32	-5	4	4	44	46	-12	4	1	12	11	2	4	1	23	22
-7	4	7	11	10	-6	4	4	28	25	-11	4	1	12	12	1	4	1	45	41
-6	4	7	40	42	-7	4	4	38	36	-10	4	1	28	26	0	4	1	54	55
-5	4	7	47	51	-9	4	4	38	35	-9	4	1	21	21	0	4	2	47	41
-4	4	7	41	42	-10	4	4	33	34	-8	4	1	24	23	1	4	2	44	50
-3	4	7	36	30	-11	4	4	21	21	-7	4	1	27	25	2	4	2	40	37
-2	4	7	24	22	-12	4	4	12	12	-6	4	1	15	16	3	4	2	57	52
-1	4	7	37	32	-14	4	3	15	19	-5	4	1	36	29	4	4	2	33	40
-1	4	6	31	31	-13	4	3	9	13	-4	4	1	23	20	5	4	2	56	53
-2	4	6	22	22	-11	4	3	14	14	-3	4	1	49	50	6	4	2	32	35
-3	4	6	27	35	-10	4	3	34	34	-2	4	1	44	39	7	4	2	16	14
-4	4	6	42	36	-9	4	3	38	35	-1	4	1	42	51	8	4	2	21	18
-5	4	6	55	55	-8	4	3	42	40	1	4	0	61	61	9	4	2	35	34
-6	4	6	25	29	-7	4	3	19	16	2	4	0	54	53	10	4	2	21	21
-8	4	6	8	8	-6	4	3	68	66	3	4	0	10	14	11	4	2	18	18
-9	4	6	15	16	-5	4	3	31	40	4	4	0	34	35	12	4	2	29	27
-10	4	6	23	22	-4	4	3	53	55	6	4	0	40	36	12	4	3	19	19
-11	4	6	18	17	-3	4	3	27	32	7	4	0	63	57	11	4	3	42	41
-13	4	6	17	18	-2	4	3	44	45	8	4	0	23	24	10	4	3	29	29
-18	4	6	17	16	-1	4	3	50	44	9	4	0	20	18	9	4	3	12	14
-15	4	5	16	17	-1	4	2	79	66	10	4	0	19	17	8	4	3	20	22
-13	4	5	11	11	-2	4	2	79	69	11	4	0	26	26	7	4	3	26	22
-12	4	5	23	23	-3	4	2	23	23	12	4	0	15	15	6	4	3	30	27
-11	4	5	19	22	-4	4	2	29	28	13	4	0	13	13	5	4	3	40	37
-10	4	5	28	29	-6	4	2	30	31	15	4	0	19	21	4	4	3	27	24
-9	4	5	25	21	-7	4	2	14	12	14	4	0	19	18	3	4	3	46	49
-8	4	5	11	12	-8	4	2	14	12	12	4	0	9	8	2	4	3	53	52
-7	4	5	24	25	-9	4	2	54	52	11	4	1	18	18	1	4	3	51	46

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
10	4	6	14	14	5	4	10	17	15	2	5	13	21	19	12	5	9	10	11
12	4	6	9	10	6	4	10	7	10	5	5	13	15	15	12	5	8	15	14
10	4	7	16	16	7	4	10	20	19	6	5	13	16	15	11	5	8	8	6
7	4	7	13	12	8	4	10	15	16	7	5	13	11	11	7	5	8	28	29
6	4	7	35	35	12	4	10	8	10	9	5	12	11	11	6	5	8	33	33
5	4	7	31	31	10	4	11	11	11	7	5	12	21	20	5	5	8	25	25
4	4	7	42	41	9	4	11	11	12	5	5	12	14	13	4	5	8	13	14
3	4	7	12	16	7	4	11	9	10	3	5	12	22	22	2	5	8	19	17
2	4	7	26	30	6	4	11	14	15	1	5	12	33	33	1	5	8	15	14
1	4	7	38	36	5	4	11	32	32	0	5	12	20	18	0	5	8	14	13
0	4	7	39	38	4	4	11	10	9	0	5	11	11	12	0	5	7	15	15
0	4	8	34	30	3	4	11	37	36	1	5	11	26	29	1	5	7	29	27
1	4	8	37	34	2	4	11	29	30	2	5	11	17	19	2	5	7	8	7
2	4	8	15	14	1	4	11	26	23	3	5	11	13	15	3	5	7	21	19
3	4	8	41	42	0	4	11	19	21	4	5	11	23	21	4	5	7	24	23
4	4	8	19	17	0	4	11	20	20	5	5	11	15	17	5	5	7	14	15
5	4	8	25	25	1	4	12	16	15	6	5	11	14	15	6	5	7	45	45
6	4	8	27	28	2	4	12	53	55	9	5	11	8	8	7	5	7	35	34
7	4	8	30	30	5	4	12	11	9	10	5	11	13	14	8	5	7	26	29
8	4	8	22	23	8	4	12	11	13	9	5	11	21	21	9	5	7	19	20
9	4	8	15	14	10	4	12	14	14	8	5	10	15	14	10	5	7	10	7
11	4	8	20	18	8	4	13	10	9	6	5	10	16	17	11	5	7	15	16
14	4	9	14	11	7	4	13	28	29	5	5	10	31	33	13	5	7	12	10
12	4	9	20	19	4	4	13	15	12	4	5	10	11	9	14	5	6	9	8
8	4	9	11	12	3	4	13	11	14	2	5	10	24	23	17	5	6	11	11
7	4	9	16	18	2	4	13	15	16	1	5	10	36	40	13	5	6	13	12
6	4	9	17	17	1	4	13	24	24	0	5	10	7	10	9	5	6	11	11
4	4	9	22	23	1	4	14	12	13	0	5	9	50	50	7	5	6	31	29
3	4	9	22	24	6	4	14	16	16	1	5	9	12	10	6	5	6	23	24
2	4	9	30	31	2	4	16	7	7	2	5	9	12	13	4	5	6	63	60
1	4	9	21	22	3	4	16	9	9	3	5	9	15	15	3	5	6	31	31
0	4	9	30	30	2	4	17	17	18	4	5	9	16	16	2	5	6	19	19
0	4	10	34	33	4	4	18	9	9	7	5	9	11	9	1	5	6	51	56
1	4	10	36	31	1	5	15	12	12	0	5	9	13	13	0	5	6	26	25
2	4	10	8	8	5	5	15	11	12	10	5	9	17	16	0	5	6	34	30
3	4	10	11	13	1	5	15	15	15	11	5	9	20	21	1	5	5	29	23

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
8	5	2	28	26	-5	5	1	29	27	-13	5	4	16	18	-2	5	6	24	23
7	5	2	25	20	-6	5	1	29	27	-11	5	4	13	12	-1	5	6	49	44
6	5	2	35	35	-7	5	1	15	15	-10	5	4	12	12	-1	5	7	38	39
4	5	2	40	39	-9	5	1	31	30	-9	5	4	32	29	-3	5	7	12	9
3	5	2	70	67	-10	5	1	14	16	-8	5	4	47	48	-5	5	7	14	14
2	5	2	52	50	-11	5	1	43	41	-7	5	4	11	11	-6	5	7	25	26
1	5	2	66	63	-12	5	1	22	24	-6	5	4	36	34	-7	5	7	16	17
0	5	2	42	46	-13	5	1	12	11	-5	5	4	28	28	-8	5	7	38	35
0	5	1	71	66	-15	5	1	21	20	-4	5	4	72	69	-9	5	7	33	31
1	5	1	17	16	-15	5	2	13	12	-3	5	4	78	73	-11	5	7	17	17
2	5	1	51	49	-14	5	2	15	14	-2	5	4	21	19	-12	5	7	20	22
3	5	1	57	60	-13	5	2	15	17	-1	5	4	19	24	-16	5	7	8	7
4	5	1	64	79	-11	5	2	30	32	-1	5	5	13	12	-18	5	7	8	9
5	5	1	38	33	-10	5	2	16	15	-2	5	5	41	39	-13	5	8	12	12
7	5	1	20	19	-9	5	2	36	30	-4	5	5	30	30	-13	5	8	22	22
8	5	1	17	13	-8	5	2	58	58	-5	5	5	40	41	-11	5	8	14	16
9	5	1	25	23	-6	5	2	36	37	-6	5	5	14	16	-10	5	8	29	32
11	5	1	13	13	-5	5	2	33	32	-7	5	5	8	8	-9	5	8	29	27
12	5	1	16	19	-4	5	2	36	33	-8	5	5	20	20	-8	5	8	25	25
14	5	0	16	15	-3	5	2	81	81	-9	5	5	13	13	-7	5	8	21	22
13	5	0	18	17	-2	5	2	65	58	-10	5	5	15	18	-6	5	8	21	19
11	5	0	20	19	-1	5	2	83	76	-11	5	5	25	26	-5	5	8	18	17
10	5	0	22	22	-1	5	2	66	66	-13	5	5	14	16	-4	5	8	36	35
9	5	0	17	14	-2	5	3	55	53	-14	5	5	17	15	-3	5	8	33	31
8	5	0	17	16	-4	5	3	31	31	-17	5	6	19	19	-2	5	8	34	32
7	5	0	20	21	-5	5	3	33	32	-14	5	6	9	11	-1	5	8	11	12
6	5	0	19	14	-6	5	3	32	28	-12	5	6	20	21	-1	5	9	29	26
5	5	0	64	60	-7	5	3	12	11	-11	5	6	30	31	-2	5	9	22	21
4	5	0	25	21	-8	5	3	18	19	-10	5	6	15	14	-3	5	9	42	41
3	5	0	15	13	-9	5	3	73	71	-9	5	6	10	10	-4	5	9	70	66
2	5	0	27	28	-10	5	3	16	19	-8	5	6	16	14	-5	5	9	21	19
1	5	0	74	67	-11	5	3	10	8	-7	5	6	10	9	-6	5	9	12	11
-1	5	1	33	34	-12	5	3	7	7	-6	5	6	8	9	-7	5	9	26	27
-2	5	1	105	103	-13	5	3	29	30	-5	5	6	20	20	-8	5	9	22	23
-3	5	1	65	59	-14	5	3	13	11	-4	5	6	32	28	-9	5	9	10	8
-4	5	1	42	32	-18	5	4	12	11	-3	5	6	20	18	-10	5	9	18	17

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-6	5	15	8	7	-7	6	12	13	13	-9	6	8	13	13	-4	6	5	21	19
-10	5	16	9	9	-9	6	12	15	11	-11	6	8	10	11	-3	6	5	12	15
-4	5	16	11	10	-15	6	11	8	8	-12	6	8	21	22	-2	6	5	28	26
-8	5	17	12	12	-11	6	11	15	15	-15	6	8	17	15	-1	6	5	51	49
-12	5	17	15	15	-10	6	11	24	24	-17	6	8	8	9	-1	6	4	56	51
-13	5	18	9	8	-8	6	11	19	19	-14	6	7	9	10	-2	6	4	48	44
-9	5	18	13	12	-7	6	11	17	20	-13	6	7	17	17	-3	6	4	20	23
-7	5	18	13	12	-6	6	11	19	17	-12	6	7	11	11	-4	6	4	24	30
-4	5	19	12	10	-5	6	11	20	18	-9	6	7	12	13	-6	6	4	12	15
-7	5	19	8	5	-4	6	11	13	16	-8	6	7	21	20	-7	6	4	9	11
-4	6	18	9	7	-3	6	11	12	13	-7	6	6	29	28	-8	6	4	12	11
-5	6	18	11	10	-2	6	11	26	25	-6	6	7	19	23	-9	6	4	34	35
-8	6	17	9	9	-1	6	11	28	30	-5	6	6	14	14	-10	6	4	11	12
-6	6	17	9	9	-1	6	10	15	16	-4	6	6	17	20	-11	6	4	18	18
-2	6	16	11	9	-2	6	10	12	12	-2	6	6	10	11	-12	6	4	21	22
-10	6	16	15	13	-4	6	10	18	17	-1	6	6	9	9	-13	6	4	15	16
-15	6	15	11	10	-5	6	10	25	29	-1	6	6	47	46	-14	6	4	9	10
-10	6	15	13	13	-6	6	10	38	41	-2	6	6	37	40	-17	6	3	14	14
-7	6	15	16	16	-7	6	10	18	20	-4	6	6	21	18	-13	6	3	18	20
-5	6	14	13	14	-10	6	10	22	24	-5	6	6	10	12	-12	6	3	29	32
-6	6	14	14	13	-11	6	10	30	32	-6	6	6	34	33	-11	6	3	14	15
-7	6	14	12	11	-12	6	10	14	13	-7	6	6	29	28	-8	6	3	20	19
-13	6	14	8	6	-16	6	9	8	9	-8	6	6	14	16	-7	6	3	27	28
-15	6	13	9	7	-13	6	9	8	11	-10	6	6	23	22	-6	6	3	31	29
-8	6	13	14	14	-11	6	9	24	24	-11	6	6	19	17	-5	6	3	13	9
-6	6	13	11	12	-10	6	9	26	27	-13	6	6	8	9	-4	6	3	36	30
-5	6	13	12	12	-6	6	9	14	12	-16	6	6	11	12	-3	6	3	39	33
-4	6	13	25	24	-5	6	9	23	25	-17	6	6	11	12	-2	6	3	36	35
-3	6	13	8	9	-3	6	9	37	36	-13	6	5	8	9	-1	6	3	73	83
-2	6	13	17	14	-2	6	9	37	35	-12	6	5	18	17	-1	6	2	35	36
-1	6	13	18	21	-1	6	8	30	33	-11	6	5	27	27	-2	6	2	34	40
-1	6	12	22	23	-2	6	8	35	38	-9	6	5	11	12	-3	6	2	27	28
-2	6	12	26	28	-3	6	8	17	15	-8	6	5	16	16	-4	6	2	59	59
-3	6	12	11	13	-4	6	8	50	48	-7	6	5	36	34	-6	6	2	45	44
-5	6	12	19	21	-7	6	8	28	29	-6	6	5	34	34	-7	6	2	22	21
-6	6	12	22	24	-8	6	8	18	18	-5	6	5	12	13	-8	6	2	14	15

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
5	6	1	26	23	4	6	4	43	40	0	6	7	17	14	5	6	14	14	13
4	6	1	10	8	5	6	4	23	21	0	6	8	23	25	7	6	14	9	9
3	6	1	39	35	6	6	4	10	12	2	6	8	33	32	9	6	14	10	10
2	6	1	73	74	8	6	4	16	14	3	6	8	31	32	6	6	15	8	10
1	6	1	23	17	9	6	4	25	28	4	6	8	20	21	5	6	16	13	12
0	6	1	33	35	10	6	4	10	9	5	6	8	14	14	5	7	14	9	9
0	6	2	18	18	12	6	4	17	17	7	6	8	16	15	4	7	14	11	9
1	6	2	69	70	11	6	5	13	13	8	6	8	12	12	0	7	13	14	15
2	6	2	28	22	9	6	5	30	27	11	6	8	14	13	2	7	13	11	11
3	6	2	23	25	8	6	5	27	24	9	6	9	16	19	8	7	12	12	11
4	6	2	14	13	7	6	5	5	36	5	6	9	16	17	5	7	12	7	7
5	6	2	10	10	6	6	5	5	25	4	6	9	16	16	3	7	12	9	11
6	6	2	18	18	5	6	5	23	39	4	6	9	16	38	2	7	12	17	12
7	6	2	17	14	4	6	5	67	63	2	6	9	40	8	1	7	12	14	11
8	6	2	26	26	3	6	5	17	19	1	6	9	8	24	0	7	12	18	9
9	6	2	18	16	2	6	5	38	35	0	6	9	23	18	0	7	11	16	17
10	6	2	11	9	1	6	5	8	8	0	6	9	18	31	0	7	11	17	16
11	6	2	16	16	0	6	5	20	19	0	6	10	30	31	1	7	11	17	16
14	6	2	15	13	1	6	6	11	11	1	6	10	13	11	3	7	11	19	18
15	6	3	13	14	2	6	6	29	28	4	6	10	17	17	4	7	11	12	10
14	6	3	13	14	3	6	6	32	29	5	6	10	20	19	10	7	11	8	9
12	6	3	16	16	4	6	6	31	31	6	6	10	20	20	12	7	10	9	8
11	6	3	30	29	5	6	6	40	36	9	6	10	13	13	8	7	10	8	10
10	6	3	10	9	6	6	6	31	28	8	6	11	12	11	6	7	10	13	11
8	6	3	52	54	7	6	6	22	18	5	6	11	16	16	4	7	10	19	20
7	6	3	39	39	8	6	6	26	25	4	6	11	8	6	3	7	10	12	12
6	6	3	12	12	9	6	6	26	14	0	6	12	21	19	1	7	10	10	11
4	6	3	44	44	13	6	7	14	17	2	6	12	27	27	0	7	9	24	28
3	6	3	44	41	9	6	6	17	17	3	6	12	14	12	2	7	9	22	21
2	6	3	64	62	7	6	6	19	19	9	6	13	15	15	3	7	9	24	24
1	6	3	77	78	6	6	6	18	16	3	6	13	17	16	4	7	9	17	17
0	6	3	52	52	5	6	6	13	16	2	6	13	13	13	5	7	9	23	20
0	6	4	13	14	3	6	6	36	38	1	6	13	16	15	8	7	9	15	18
1	6	4	23	23	2	6	6	17	15	0	6	13	14	14	7	7	8	17	18
2	6	4	9	10	1	6	6	21	20	1	6	14	14	14	4	7	8	22	20
3	6	4	9	10	2	6	6	21	20	2	6	14	12	13	3	7	8	25	49
5	6	4	9	10	1	6	6	21	20	2	6	14	12	13	3	7	8	26	34

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	7	4	21	19	9	7	1	15	15	-1	7	2	18	19	-10	7	5	14	16
2	7	4	15	15	10	7	1	30	33	-1	7	3	31	28	-11	7	5	16	17
1	7	4	39	39	11	7	1	26	26	-2	7	3	44	45	-14	7	6	22	21
0	7	4	24	24	12	7	1	21	22	-3	7	3	10	8	-11	7	6	18	18
0	7	3	28	22	12	7	0	12	11	-5	7	3	11	11	-10	7	6	19	18
1	7	3	17	19	11	7	0	12	10	-6	7	3	18	17	-9	7	6	24	23
2	7	3	38	36	10	7	0	13	14	-7	7	3	41	39	-7	7	6	30	34
3	7	3	27	28	9	7	0	27	29	-8	7	3	24	23	-6	7	6	18	18
4	7	3	24	26	8	7	0	33	35	-10	7	3	18	19	-5	7	6	17	17
5	7	3	22	24	7	7	0	26	28	-11	7	3	13	13	-4	7	6	55	58
7	7	3	29	28	6	7	0	22	21	-12	7	3	13	15	-3	7	6	25	23
8	7	3	15	16	5	7	0	14	14	-13	7	3	17	17	-1	7	7	27	25
9	7	3	15	16	4	7	0	28	29	-16	7	3	12	13	-2	7	7	17	17
10	7	3	17	17	2	7	0	56	53	-14	7	4	19	20	-3	7	7	20	22
11	7	3	9	10	1	7	0	68	72	-16	7	4	12	12	-4	7	7	45	45
12	7	3	9	8	-1	7	1	22	22	-13	7	4	15	15	-5	7	7	43	46
14	7	3	9	9	-2	7	1	55	59	-11	7	4	21	20	-6	7	7	20	20
15	7	2	8	9	-3	7	1	36	33	-10	7	4	8	10	-7	7	7	14	15
11	7	2	28	28	-4	7	1	54	55	-9	7	4	17	19	-9	7	7	18	19
9	7	2	13	12	-5	7	1	11	10	-8	7	4	39	41	-11	7	7	13	14
8	7	2	18	14	-6	7	1	15	17	-7	7	4	13	12	-12	7	7	8	8
7	7	2	8	8	-8	7	1	22	19	-6	7	4	20	19	-13	7	7	16	16
6	7	2	45	48	-9	7	1	27	28	-5	7	4	13	13	-14	7	7	10	11
4	7	2	11	12	-14	7	1	13	14	-4	7	4	14	12	-10	7	8	11	12
3	7	2	32	32	-14	7	2	13	14	-3	7	4	13	14	-6	7	8	17	14
2	7	2	14	11	-13	7	2	14	15	-2	7	4	14	16	-5	7	8	35	37
1	7	2	34	30	-12	7	2	17	17	-1	7	4	30	28	-4	7	8	24	26
0	7	2	41	43	-11	7	2	16	15	-1	7	5	30	29	-3	7	8	10	10
0	7	1	63	61	-10	7	2	14	14	-2	7	5	36	39	-2	7	8	28	34
1	7	1	80	80	-9	7	2	18	18	-3	7	5	13	12	-1	7	9	26	24
2	7	1	41	41	-7	7	2	21	20	-4	7	5	15	18	-1	7	9	33	36
3	7	1	13	12	-6	7	2	33	34	-5	7	5	17	17	-2	7	9	14	18
4	7	1	10	11	-5	7	2	26	23	-6	7	5	16	16	-4	7	9	19	20
5	7	1	23	21	-4	7	2	40	38	-7	7	5	33	32	-5	7	9	7	5
7	7	1	20	20	-3	7	2	25	27	-8	7	5	39	41	-7	7	9	23	22
8	7	1	33	31	-2	7	2	24	24	-9	7	5	25	26	-8	7	9	19	18

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8	8	15	15	14	-3	8	8	28	31	-12	8	5	15	14	-6	8	2	12	8
-4	8	15	8	7	-4	8	8	12	13	-11	8	5	21	22	-7	8	2	16	15
-8	8	14	13	12	-5	8	8	38	40	-10	8	5	12	15	-9	8	2	13	12
-14	8	13	8	10	-6	8	8	15	15	-9	8	5	22	22	-10	8	2	33	33
-11	8	13	10	9	-7	8	8	25	27	-8	8	5	14	12	-15	8	1	13	12
-7	8	13	21	21	-9	8	8	12	12	-6	8	5	40	40	-12	8	1	13	12
-4	8	13	11	12	-10	8	8	20	21	-5	8	5	13	13	-10	8	1	31	29
-2	8	13	7	8	-11	8	8	11	10	-4	8	5	13	16	-9	8	1	17	20
-1	8	13	15	15	-14	8	8	9	9	-3	8	5	41	42	-7	8	1	25	25
-1	8	12	18	17	-14	8	7	12	12	-2	8	5	17	20	-6	8	1	16	12
-3	8	12	17	16	-13	8	7	11	11	-1	8	5	21	24	-4	8	1	15	16
-4	8	12	12	11	-12	8	7	12	12	-1	8	4	16	13	-3	8	1	20	18
-5	8	12	12	15	-10	8	7	33	31	-2	8	4	9	9	-2	8	1	30	30
-8	8	12	10	7	-9	8	7	14	15	-3	8	4	19	17	-1	8	1	39	36
-14	8	12	11	11	-8	8	7	12	13	-4	8	4	13	11	1	8	0	19	20
-13	8	11	14	14	-7	8	7	16	18	-5	8	4	43	47	2	8	0	25	21
-6	8	11	11	10	-5	8	7	26	27	-6	8	4	26	25	3	8	0	8	8
-5	8	11	20	19	-4	8	7	30	30	-7	8	4	37	40	4	8	0	32	37
-4	8	11	10	9	-3	8	7	23	24	-8	8	4	17	18	5	8	0	23	24
-3	8	11	26	27	-2	8	7	14	14	-10	8	4	16	16	6	8	0	27	30
-1	8	10	12	13	-1	8	7	20	16	-11	8	4	15	15	7	8	0	39	42
-3	8	10	37	39	-1	8	6	20	24	-15	8	4	15	14	8	8	0	16	17
-8	8	10	18	18	-2	8	6	21	22	-16	8	3	12	11	9	8	0	19	22
-9	8	10	9	11	-3	8	6	29	25	-10	8	3	27	31	10	8	0	16	16
-10	8	10	9	10	-4	8	6	32	32	-9	8	3	16	17	11	8	0	17	18
-11	8	9	13	15	-6	8	6	16	14	-8	8	3	16	16	12	8	0	14	15
-10	8	9	17	17	-7	8	6	23	23	-7	8	3	11	14	14	8	0	16	16
-9	8	9	13	10	-9	8	6	25	24	-6	8	3	39	41	12	8	1	21	21
-8	8	9	26	27	-10	8	6	10	10	-5	8	3	44	41	11	8	1	24	24
-7	8	9	14	12	-11	8	6	10	9	-4	8	3	24	27	10	8	1	19	20
-6	8	9	13	11	-12	8	6	10	10	-3	8	3	18	19	9	8	1	14	12
-3	8	9	24	24	-16	8	6	10	10	-2	8	3	10	9	8	8	1	9	9
-2	8	9	12	10	-18	8	5	10	12	-2	8	2	21	15	7	8	1	14	13
-1	8	9	14	15	-16	8	5	16	16	-3	8	2	13	11	6	8	4	20	20
-1	8	8	14	12	-15	8	5	11	12	-4	8	2	25	25	5	8	4	27	27
-2	8	8	14	11	-14	8	5	11	11	-5	8	2	25	21	5	8	4	27	21
			12	11	-14	8	5	18	16	-5	8	2	33	31	3	8	4	12	11

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 16

CHIRAL HEXA-HOST

ACETIC ACID GUES

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
9	8	5	19	21	8	8	11	11	12	8	9	6	15	15	6	9	2	35	37
8	8	5	19	18	6	8	11	14	12	7	9	6	21	23	4	9	2	20	23
7	8	5	24	25	2	8	11	26	28	6	9	6	16	13	3	9	2	20	20
5	8	5	14	20	1	8	11	21	22	4	9	6	21	21	2	9	2	13	14
4	8	5	15	12	0	8	12	10	10	3	9	6	20	27	1	9	2	11	12
3	8	5	15	13	2	8	12	8	7	1	9	6	40	40	0	9	2	12	10
2	8	5	23	25	4	8	12	8	9	0	9	6	19	19	0	9	2	11	11
1	8	5	43	45	8	8	13	8	8	0	9	5	17	15	1	9	1	31	31
0	8	5	26	24	4	8	13	9	7	1	9	5	17	19	3	9	3	26	27
0	8	6	17	18	1	8	15	7	8	2	9	5	28	31	4	9	3	22	23
1	8	6	15	12	2	9	15	12	11	4	9	5	23	26	5	9	1	18	17
2	8	6	43	39	3	9	13	8	7	6	9	5	14	14	6	9	3	21	18
4	8	6	17	17	3	9	12	7	6	14	9	4	14	14	7	9	3	14	14
5	8	6	19	20	0	9	11	14	14	10	9	4	15	13	8	9	3	20	21
6	8	6	27	29	1	9	11	17	15	9	9	4	15	21	10	9	3	19	18
7	8	6	7	8	2	9	11	9	7	8	9	4	20	17	11	9	3	14	14
12	8	6	12	11	4	9	11	17	18	7	9	4	16	17	11	9	3	21	19
5	8	7	21	22	7	9	11	10	9	6	9	4	14	11	9	9	4	8	11
3	8	7	18	17	5	9	10	13	11	5	9	4	12	15	8	9	4	16	18
2	8	7	23	26	2	9	10	14	16	4	9	4	23	24	6	9	4	12	13
1	8	7	36	38	1	9	10	21	23	3	9	4	22	17	5	9	4	27	27
0	8	7	26	26	0	9	10	20	18	2	9	4	14	17	3	9	4	33	32
0	8	8	24	24	0	9	9	25	30	1	9	4	19	15	2	9	4	17	17
1	8	8	16	16	5	9	8	10	10	0	9	4	17	16	1	9	4	22	24
3	8	8	24	28	4	9	8	22	23	2	9	4	29	29	1	9	5	14	16
5	8	8	26	28	3	9	8	16	16	3	9	4	21	17	-3	9	5	13	15
6	8	8	12	15	2	9	8	19	17	4	9	4	18	15	-4	9	5	22	24
8	8	8	16	16	0	9	7	13	13	5	9	4	15	16	-5	9	5	13	15
7	8	8	12	11	1	9	7	25	29	6	9	4	25	24	-6	9	5	22	21
4	8	8	20	21	2	9	7	13	15	7	9	4	21	23	-7	9	5	21	23
3	8	8	13	15	3	9	7	11	10	11	9	4	13	11	-8	9	5	13	13
2	8	8	19	17	4	9	7	21	23	13	9	4	8	15	-11	9	5	14	14
1	8	8	12	9	6	9	7	22	22	12	9	4	12	8	-12	9	5	23	22
0	8	8	24	24	7	9	7	13	14	10	9	4	21	11	-14	9	6	18	17
1	8	8	17	15	8	9	7	18	19	9	9	4	21	21	-11	9	6	15	17
12	8	8	12	11	9	9	6	13	13	11	9	4	30	30	-10	9	6	10	10

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8	9	6	11	12	-3	9	11	10	12	-2	10	8	28	31	-4	10	4	22	24	9	10	1	28	26
-7	9	6	8	6	-4	9	11	12	15	-3	10	8	18	16	-5	10	4	11	10	7	10	1	11	10
-6	9	6	14	13	-5	9	11	9	9	-4	10	8	18	17	-6	10	4	34	36	5	10	1	9	10
-5	9	6	12	15	-6	9	11	9	7	-5	10	8	20	20	-9	10	4	10	10	3	10	1	21	20
-4	9	6	15	12	-16	9	11	10	9	-7	10	8	23	24	-10	10	4	12	14	1	10	1	24	27
-3	9	6	15	17	-13	9	12	7	7	-10	10	8	12	12	-12	10	4	12	12	0	10	1	14	16
-2	9	6	24	26	-11	9	12	10	8	-12	10	8	13	12	-13	10	4	11	10	0	10	2	13	12
-1	9	6	47	48	-6	9	12	13	11	-13	10	8	10	10	-12	10	3	13	11	1	10	2	18	20
-1	9	7	17	15	-2	9	12	14	16	-13	10	7	8	7	-8	10	3	16	16	2	10	2	21	21
-2	9	7	10	11	-3	9	13	11	10	-10	10	7	12	11	-6	10	3	17	19	4	10	2	9	11
-3	9	7	24	24	-6	9	13	11	11	-8	10	7	14	13	-5	10	3	25	27	5	10	2	8	11
-5	9	7	13	15	-4	9	14	8	10	-7	10	7	27	27	-3	10	3	17	17	8	10	2	17	17
-6	9	7	25	26	-6	9	18	8	5	-6	10	7	15	15	-1	10	3	14	16	9	10	2	12	13
-7	9	7	12	13	-4	10	17	8	6	-3	10	7	13	14	-2	10	2	11	16	10	10	2	9	9
-9	9	7	26	24	-6	10	15	10	11	-2	10	7	44	46	-3	10	2	11	10	13	10	2	17	15
-16	9	7	10	10	-5	10	15	14	13	-1	10	7	10	11	-4	10	2	24	24	14	10	3	9	8
-13	9	8	13	14	-1	10	15	9	9	-1	10	6	13	13	-7	10	2	24	22	13	10	3	17	16
-11	9	8	14	13	-12	10	13	11	10	-2	10	6	16	17	-8	10	2	16	19	8	10	3	24	25
-10	9	8	17	17	-8	10	13	10	9	-3	10	6	19	18	-9	10	2	23	22	7	10	3	16	15
-9	9	8	18	18	-7	10	13	12	14	-12	10	1	20	17	-11	10	1	15	17	3	10	3	22	20
-8	9	8	18	22	-4	10	12	13	13	-6	10	6	17	19	-8	10	1	28	30	2	10	3	18	22
-6	9	8	20	14	-1	10	12	7	8	-9	10	6	9	8	-7	10	1	17	18	1	10	4	11	10
-5	9	8	13	13	-2	10	12	9	11	-10	10	6	14	17	-6	10	1	33	34	3	10	4	24	26
-2	9	9	23	24	-7	10	11	16	7	-14	10	5	8	7	-3	10	1	13	13	6	10	4	16	16
-3	9	9	17	17	-7	10	11	25	17	-12	10	5	13	14	-2	10	1	10	10	7	10	4	21	24
-5	9	9	33	33	-1	10	10	25	25	-12	10	5	15	15	-1	10	1	11	12	8	10	4	15	12
-7	9	9	12	24	-3	10	10	13	14	-11	10	5	15	15	1	10	0	17	18	14	10	4	14	11
-9	9	9	12	12	-6	10	10	26	28	-8	10	5	8	8	1	10	0	17	18	8	10	4	14	11
-8	9	10	16	16	-11	10	10	6	6	-7	10	5	19	17	2	10	0	24	23	14	10	5	8	9
-7	9	10	8	9	-13	10	10	9	10	-6	10	5	35	36	3	10	0	17	17	10	10	5	8	9
-6	9	10	13	11	-13	10	9	11	12	-5	10	5	16	19	4	10	0	23	24	9	10	5	14	14
-4	9	10	12	12	-9	10	9	14	12	-4	10	5	14	15	6	10	0	16	13	7	10	5	17	19
-3	9	10	10	9	-6	10	9	15	16	-5	10	5	19	20	7	10	0	19	18	4	10	5	23	27
-1	9	11	23	21	-4	10	9	19	22	-1	10	5	37	38	8	10	0	18	17	1	10	5	23	26
-2	9	11	13	11	-2	10	9	14	14	-2	10	4	9	9	11	10	0	12	12	0	10	6	16	16

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	10	6	14	18	1	11	7	15	15	8	11	1	22	20	-15	11	6	8	8
3	10	6	9	12	3	11	7	22	22	13	11	1	15	15	-10	11	6	8	10
4	10	6	17	19	6	11	7	15	15	9	11	0	16	17	-7	11	6	14	16
5	10	6	13	13	9	11	6	13	13	8	11	0	18	20	-6	11	6	25	26
6	10	6	19	19	6	11	6	14	15	6	11	0	18	16	-4	11	6	27	29
9	10	6	16	16	3	11	6	15	17	4	11	0	14	13	-2	11	6	20	19
7	10	7	13	13	0	11	6	13	14	3	11	0	19	20	-1	11	6	19	21
4	10	7	18	19	0	11	5	11	10	2	11	0	17	17	-1	11	7	21	18
3	10	7	19	19	1	11	5	13	13	1	11	0	20	20	-2	11	7	19	20
2	10	7	24	25	3	11	5	12	12	-1	11	1	18	20	-4	11	7	20	19
1	10	7	18	17	5	11	5	11	10	-2	11	1	11	11	-6	11	7	23	25
3	10	8	26	24	6	11	5	12	12	-3	11	1	13	15	-9	11	8	17	16
5	10	8	8	7	7	11	5	15	14	-4	11	1	14	13	-6	11	8	18	18
8	10	9	10	11	9	11	5	13	14	-6	11	1	24	24	-2	11	8	15	17
4	10	9	10	10	7	11	4	24	25	-7	11	1	20	24	-1	11	9	11	11
2	10	9	19	19	5	11	4	15	15	-9	11	1	11	13	-2	11	9	16	14
1	10	9	15	11	4	11	4	25	20	-11	11	2	9	9	-5	11	9	9	10
0	10	9	16	17	4	11	4	23	27	-10	11	2	10	9	-8	11	9	17	17
4	10	10	17	18	1	11	4	25	24	-9	11	2	11	13	-13	11	9	13	14
7	10	10	11	13	0	11	3	8	9	-8	11	2	8	7	-6	11	10	15	15
0	10	11	13	14	2	11	3	21	19	-7	11	2	13	13	-5	11	10	11	10
2	10	14	9	8	3	11	3	13	12	-4	11	2	13	13	-4	11	10	9	8
0	11	13	12	13	7	11	3	11	14	-4	11	3	9	7	-2	11	10	15	15
1	11	13	10	9	14	11	2	9	8	-5	11	3	20	21	-1	11	11	10	10
1	11	11	8	10	13	11	2	17	17	-7	11	3	12	11	-4	11	11	10	7
3	11	11	13	13	8	11	2	14	13	-9	11	3	9	8	-9	11	12	11	11
4	11	10	11	12	5	11	2	12	13	-13	11	3	11	10	-4	11	13	7	8
0	11	9	16	17	3	11	2	18	19	-15	11	4	14	14	-7	11	14	8	8
1	11	9	11	9	1	11	2	10	11	-9	11	4	14	15	-5	11	15	12	12
5	11	9	17	16	0	11	2	9	12	-8	11	4	29	27	-3	12	16	8	7
7	11	9	15	15	0	11	1	19	19	-5	11	5	10	10	-5	12	14	10	8
8	11	8	12	14	1	11	1	13	12	-1	11	5	12	12	-3	12	12	10	9
3	11	8	10	8	2	11	1	13	13	-2	11	5	10	9	-10	12	12	12	12
2	11	8	22	21	4	11	1	23	24	-4	11	5	16	16	-9	12	11	8	10
1	11	8	17	17	5	11	1	12	12	-6	11	5	18	18	-4	12	11	10	10
1	11	8	20	20	7	11	1	10	10	-8	11	5	9	9	-3	12	11	13	13
C	11	9	20	20	7	11	1	10	10	-10	11	5	9	8	-3	12	11	13	13

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										CHIRAL HEXA-HOST				ACETIC ACID GUES				PAGE 19		
H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	
1	12	0	10	11	5	12	6	12	13	-6	13	9	14	14	4	14	5	13	12	
2	12	0	10	11	6	12	6	18	18	-9	13	11	12	12	6	14	6	14	14	
3	12	0	18	17	7	12	7	8	9	-9	13	12	15	12	3	14	7	11	11	
5	12	0	11	10	5	12	7	20	20	-5	14	13	7	5	3	14	8	10	10	
6	12	0	15	13	2	12	8	11	12	-11	14	9	8	6	1	15	5	7	6	
7	12	0	14	13	8	12	8	15	15	-3	14	8	11	11	5	15	5	12	12	
6	12	1	14	14	7	12	9	16	16	-5	14	8	14	14	8	15	3	7	9	
1	12	1	21	23	2	12	9	8	8	-6	14	8	14	12	-2	15	1	8	11	
0	12	1	14	14	1	12	11	8	7	-4	14	7	7	9	-5	15	1	8	5	
0	12	2	21	19	0	12	12	11	10	-7	14	6	13	13	-3	15	2	12	12	
1	12	2	8	7	2	12	13	17	15	-2	14	5	14	14	-2	15	2	11	12	
5	12	2	27	26	1	12	13	12	12	-7	14	4	17	16	-1	15	2	10	11	
12	12	2	7	8	1	12	14	10	10	-10	14	4	10	8	-7	15	4	9	9	
13	12	2	13	13	3	13	13	11	10	-6	14	3	17	18	-6	15	4	8	10	
10	12	3	18	18	1	13	12	11	11	-1	14	3	12	11	-3	15	5	6	7	
4	12	3	12	12	0	13	12	11	11	-2	14	2	12	11	-5	15	6	10	11	
1	12	3	12	13	1	13	11	16	15	-8	14	1	11	9	-5	16	6	8	7	
0	12	3	19	19	0	13	9	8	8	-1	14	1	10	9	-5	16	6	12	12	
0	12	4	11	9	7	13	8	15	12	3	14	0	14	14	-5	16	5	10	10	
2	12	4	11	9	4	13	8	10	9	3	14	2	14	13	-3	16	3	12	9	
3	12	4	12	11	6	13	7	17	17	11	14	2	10	9	-2	16	2	12	8	
4	12	4	15	17	7	13	6	12	11	10	14	3	12	8	5	16	1	9	8	
5	12	4	12	10	5	13	6	14	15	8	14	3	10	12	0	16	0	12	12	
9	12	5	12	13	1	13	6	18	19	3	14	3	10	8	0	16	1	13	12	
2	12	5	14	13	2	13	5	11	11	3	14	3	10	11	3	16	2	9	9	
0	12	6	13	11	3	13	5	15	14	4	14	4	8	10	5	16	4	11	10	
2	12	6	12	13	4	13	5	13	13	7	14	4	9	8	3	17	0	9	8	
3	12	6	15	18	12	13	4	10	11	6	14	5	8	14	2	17	0	8	7	

END OF LISTING OF FILE :GACA66.PRINT(1,*,1) FOR USER GACA66 AT 1979/11/24__05:21:53

Isochapliatrin(Ib)

Crystal data

Isochapliatrin, $C_{24}H_{32}O_{10}$, $M_r=480.5$, orthorhombic, $a=7.449(2)$,
 $b=19.898(1)$, $c=16.367(2)$ Å, $U=2425.9$ Å³, $D_m=1.32$, $D_c=1.31$ Mgm⁻³,
 $Z=4$, $F(000)=1024$, space group $P2_12_12_1$, $\mu(Mo-K\alpha)=1.10$ cm⁻¹.

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	PAGE
2	0	0	47	48	6	0	5	19	17	6	0	10	5	6	0	1	15	10	10	1
4	0	0	12	13	5	0	5	15	15	7	0	10	6	4	1	15	11	11	8	7
6	0	0	4	4	3	0	5	15	12	6	0	11	11	10	2	15	8	8	12	14
6	0	1	5	7	2	0	5	30	29	5	0	11	8	8	3	15	7	7	12	8
5	0	1	4	4	1	0	5	32	33	4	0	11	13	14	6	15	4	4	1	18
4	0	1	28	30	0	0	6	88	90	2	0	11	7	6	4	14	6	6	4	42
3	0	1	36	38	1	0	6	37	28	1	0	11	26	24	2	14	12	12	12	36
2	0	1	109	106	2	0	6	57	58	0	0	12	18	18	1	14	9	10	16	16
1	0	1	20	21	3	0	6	58	58	1	0	12	16	18	0	14	19	19	19	64
0	0	2	43	50	4	0	6	21	19	3	0	12	9	5	0	13	11	12	12	19
1	0	2	73	72	5	0	6	23	24	4	0	12	11	8	1	13	13	16	16	23
2	0	2	26	25	7	0	6	4	1	4	0	13	6	4	2	13	8	9	9	6
3	0	2	26	24	8	0	6	7	6	3	0	13	5	4	3	13	10	10	10	12
4	0	2	28	29	8	0	7	4	4	2	0	13	5	5	4	13	12	13	13	8
5	0	2	8	9	6	0	7	13	14	1	0	14	8	9	6	12	7	7	9	10
7	0	2	26	26	5	0	7	6	5	2	0	14	8	5	4	12	14	13	8	9
8	0	2	7	8	4	0	7	11	10	3	0	14	9	11	7	12	12	15	7	7
9	0	2	4	2	3	0	7	29	27	4	0	14	8	9	2	12	20	22	20	20
8	0	3	5	2	2	0	7	38	39	5	0	14	6	6	1	12	9	5	16	18
7	0	3	7	7	1	0	7	55	52	3	0	15	5	9	0	11	11	13	16	31
5	0	3	10	9	0	0	8	39	39	0	0	15	8	7	1	11	16	16	33	14
4	0	3	7	5	2	0	8	5	4	2	0	16	4	7	2	11	11	10	19	73
3	0	3	27	26	3	0	8	21	23	3	0	16	11	13	1	11	12	12	72	16
2	0	3	20	20	4	0	8	11	9	4	0	16	8	8	0	10	15	17	16	25
1	0	3	13	13	5	0	8	9	7	1	0	18	5	3	5	11	9	8	26	44
0	0	4	67	69	6	0	9	7	8	4	0	18	6	5	4	11	13	11	43	26
1	0	4	37	38	7	0	9	7	5	5	0	18	3	1	2	10	21	27	27	12
2	0	4	21	18	5	0	9	5	8	4	1	18	6	3	1	10	16	13	13	12
3	0	4	18	18	2	0	9	9	8	1	1	18	6	3	1	10	16	15	15	14
4	0	4	8	6	1	0	9	16	18	0	0	18	3	3	0	10	6	2	7	8
5	0	4	10	8	0	0	10	17	20	0	0	17	6	7	0	9	17	16	10	9
6	0	4	4	4	1	0	10	19	16	2	0	17	4	3	2	9	10	8	10	11
7	0	4	6	5	2	0	10	16	15	3	0	17	4	4	3	9	7	8	6	5
8	0	4	11	11	3	0	10	9	9	3	0	16	9	5	4	1	15	18	15	15
8	0	5	5	5	4	0	10	8	7	2	0	16	5	7	1	1	18	8	14	12
7	0	5	7	8	5	0	10	11	10	0	0	16	7	7	1	1	19	5	11	

ISOCHAPLATRIN 1(B)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	PAGE
5	1	4	12	12	2	1	0	47	47	0	2	3	66	70	2	2	8	30	26	11
4	1	4	13	13	1	1	0	71	64	0	2	4	49	50	3	2	8	14	14	9
3	1	4	28	30	0	2	0	68	72	1	2	4	75	76	4	2	8	10	10	12
2	1	4	20	18	1	2	0	9	6	2	2	4	67	66	5	2	8	16	16	4
1	1	4	56	59	2	2	0	15	15	3	2	4	30	30	7	2	9	6	7	0
0	1	4	32	37	3	2	0	18	18	4	2	4	4	4	6	2	9	13	15	5
0	1	3	15	11	4	2	0	19	18	5	2	4	15	14	5	2	9	7	3	7
1	1	3	96	98	5	2	0	28	26	6	2	4	14	14	4	2	9	12	13	3
2	1	3	20	18	6	2	0	7	7	8	2	4	10	11	3	2	9	7	7	0
3	1	3	20	20	7	2	0	5	5	8	2	5	7	8	2	2	9	21	20	4
4	1	3	19	18	8	2	0	7	8	7	2	5	13	12	1	2	9	14	14	3
5	1	3	13	13	7	2	1	19	19	6	2	5	13	14	0	2	10	6	5	4
6	1	3	8	9	6	2	1	11	12	5	2	5	14	15	2	2	10	24	26	4
7	1	3	4	5	4	2	1	6	7	4	2	5	16	15	3	2	10	12	8	4
8	1	3	12	11	3	2	1	48	45	3	2	5	47	51	4	2	10	8	9	5
9	1	2	6	6	2	2	1	24	21	2	2	5	27	28	5	2	10	13	9	0
8	1	2	7	7	1	2	1	32	32	1	2	5	31	33	6	2	10	7	7	6
6	1	2	14	14	0	2	1	124	134	0	2	5	66	69	7	2	10	4	5	12
5	1	2	21	22	0	2	1	76	83	0	2	6	18	20	5	2	11	8	5	0
4	1	2	14	13	0	2	2	84	82	1	2	6	24	19	4	2	11	12	13	6
3	1	2	26	26	1	2	2	62	52	2	2	6	20	17	3	2	11	12	15	4
2	1	2	102	98	2	2	2	19	18	3	2	6	16	14	2	2	11	7	15	4
1	1	2	69	71	3	2	2	34	32	4	2	6	10	9	1	2	11	11	13	8
0	1	2	18	18	4	2	2	8	7	5	2	6	23	24	0	2	11	10	13	0
1	1	1	84	83	5	2	2	12	10	6	2	6	20	21	2	2	12	7	14	17
2	1	1	58	57	6	2	2	15	16	7	2	6	6	6	3	2	12	9	14	20
3	1	1	16	15	7	2	2	6	7	7	2	6	6	3	4	2	12	9	13	11
4	1	1	24	25	8	2	2	7	7	6	2	7	6	7	5	2	12	7	13	11
5	1	1	8	8	8	2	2	7	8	5	2	7	15	15	6	2	13	10	13	9
6	1	1	15	15	7	2	2	10	9	4	2	7	12	12	4	2	13	12	13	11
7	1	1	10	10	6	2	2	7	6	3	2	7	12	10	3	2	13	8	13	9
9	1	1	6	6	5	2	2	13	13	2	2	7	9	6	2	2	13	5	12	7
9	1	0	8	8	4	2	2	26	24	1	2	7	18	12	1	2	10	6	7	6
7	1	0	9	9	0	2	2	27	26	0	2	7	33	37	1	2	16	5	5	5
4	1	0	29	27	0	2	2	48	48	0	2	8	10	12	2	2	16	13	3	8
3	1	0	9	11	1	2	2	48	48	1	2	8	31	30	4	2	14	8	2	8

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

ISOCHAPLATRIN 1(B)

PAGE 3

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	PAGE
1	3	12	10	6	4	3	6	22	21	6	3	2	21	21	2	4	1	63	67	15
0	3	12	12	11	3	3	6	28	4	5	3	2	38	3	3	4	2	36	36	27
0	3	11	8	5	2	3	6	26	29	4	4	2	29	35	1	4	2	45	41	8
1	3	11	6	9	1	3	6	14	35	3	3	2	35	28	2	4	2	80	80	6
2	3	11	13	11	0	3	6	49	49	2	3	2	58	30	3	4	2	47	46	13
3	3	11	6	6	0	3	5	54	58	1	3	2	58	59	4	4	2	17	16	15
4	3	11	13	12	1	3	5	45	56	0	3	2	56	59	5	4	2	9	8	19
6	3	11	4	5	2	3	5	33	26	0	3	1	26	28	6	4	2	15	15	20
6	3	10	5	5	3	3	5	9	137	1	3	1	137	139	7	4	2	6	7	23
5	3	10	6	5	2	3	5	6	11	2	3	1	11	9	8	4	2	7	7	31
4	3	10	13	12	3	3	5	10	44	3	3	1	44	43	9	4	2	6	8	2
3	3	10	13	12	5	3	5	20	9	4	3	1	9	9	0	4	2	5	4	11
1	3	10	7	7	6	3	5	4	19	5	3	1	19	20	6	4	3	10	11	18
0	3	10	16	19	7	3	5	10	16	6	3	1	16	16	8	4	3	14	13	24
0	3	9	6	5	8	3	5	5	6	9	3	1	6	7	5	4	3	21	22	13
2	3	9	36	32	9	3	4	6	4	8	3	0	4	5	4	4	3	13	11	15
3	3	9	23	26	8	3	4	7	11	7	3	0	11	11	2	4	3	63	61	21
4	3	9	10	10	7	3	4	10	8	5	3	0	8	9	1	4	3	34	32	10
5	3	9	15	16	6	3	4	13	7	4	3	0	7	5	0	4	3	82	85	10
7	3	8	7	8	5	3	4	24	23	3	3	0	23	22	1	4	4	40	42	4
6	3	8	6	6	4	3	4	14	85	2	4	0	85	84	1	4	4	27	26	17
4	3	8	8	8	3	3	4	30	7	0	4	0	7	5	3	4	4	27	25	33
3	3	8	13	12	2	3	4	10	158	1	4	0	158	160	4	4	4	15	12	9
2	3	8	28	30	1	3	4	37	16	2	4	0	16	16	6	4	4	5	3	9
1	3	8	20	16	0	3	4	11	37	3	4	0	10	11	4	4	4	31	31	15
0	3	8	7	10	0	3	3	48	47	4	4	0	39	40	5	4	4	11	13	16
0	3	7	16	18	1	3	3	50	48	5	4	0	10	10	6	4	4	8	6	15
1	3	7	43	43	2	3	3	25	24	6	4	0	8	8	7	4	4	9	7	5
2	3	7	21	24	3	3	3	14	13	8	4	1	5	4	5	4	4	22	23	18
3	3	7	18	19	4	3	3	16	17	7	4	1	13	13	4	4	4	12	14	17
4	3	7	7	7	5	3	3	20	21	6	4	1	4	3	5	4	4	5	5	6
5	3	7	21	22	6	3	3	5	13	6	4	1	14	13	3	4	4	33	32	6
7	3	7	9	10	6	3	3	12	31	5	4	1	32	31	2	4	4	8	9	6
9	3	6	5	4	8	3	3	5	50	4	4	1	50	50	0	4	4	61	59	8
7	3	6	13	14	8	3	3	8	75	3	4	1	78	75	0	4	4	20	14	7
5	3	6	9	6	7	3	3	11	46	1	4	1	47	46	1	4	4	18	16	5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	4	11	20	21	0	5	16	6	4	5	5	9	11	10	6	5	4	6	6
1	4	11	10	11	1	6	15	9	10	6	5	9	6	5	10	5	4	10	11
0	4	11	12	12	2	7	15	7	8	7	5	9	4	5	10	5	4	10	10
0	4	12	5	4	3	8	15	11	14	8	5	8	6	5	13	5	4	10	9
1	4	12	12	10	4	2	15	5	2	7	5	8	7	7	13	5	4	13	10
2	4	12	8	9	4	7	14	7	8	6	5	8	15	17	25	1	0	18	25
3	4	12	9	6	3	5	14	6	6	5	5	8	15	18	34	3	4	34	17
4	4	12	7	7	2	4	14	8	9	4	5	8	15	32	45	1	0	45	32
5	4	12	5	4	0	3	13	13	15	3	5	8	13	23	29	2	3	29	23
6	4	12	3	2	0	2	13	8	7	2	5	8	33	24	60	3	6	60	24
6	4	13	5	5	0	1	13	11	9	1	5	8	33	30	5	6	0	5	30
5	4	13	6	8	2	4	13	4	5	0	5	8	43	41	11	6	0	11	41
4	4	13	8	8	4	7	13	7	3	0	5	8	30	29	6	6	0	6	29
3	4	13	4	4	7	5	13	4	3	1	5	8	16	17	8	6	1	5	17
2	4	13	10	6	5	4	12	4	2	2	5	8	41	38	6	6	1	10	38
1	4	13	13	12	4	3	12	7	6	3	5	8	15	15	5	5	1	16	15
0	4	14	17	20	3	4	12	8	6	4	5	8	13	14	4	6	1	16	14
1	4	14	7	6	2	5	12	7	6	5	5	8	7	7	7	6	1	16	7
2	4	14	8	7	1	7	12	8	10	7	5	8	11	11	10	6	1	16	11
6	4	15	3	4	0	8	12	9	10	8	5	8	11	10	11	6	1	16	10
4	4	15	5	7	0	7	12	17	17	8	5	8	12	12	24	0	0	24	28
1	4	16	12	11	1	6	11	18	19	7	5	8	12	8	47	1	2	47	44
0	4	16	6	8	3	5	11	9	10	6	5	8	25	24	26	2	3	26	19
2	4	16	8	9	5	4	11	6	5	4	5	8	23	23	38	3	4	38	39
4	4	16	6	9	6	3	10	4	5	2	5	8	15	35	38	5	5	35	52
5	4	16	3	5	5	6	10	15	11	1	5	8	24	23	64	6	6	24	64
2	4	19	4	4	3	7	10	11	10	0	5	8	20	18	7	7	8	7	8
1	5	20	5	5	2	5	10	10	11	1	5	8	21	17	10	8	9	8	7
1	5	18	3	5	0	4	9	12	11	2	5	8	12	11	16	6	3	6	3
0	5	17	7	6	0	3	9	14	16	3	5	8	12	19	26	8	6	12	5
2	5	17	3	4	1	4	9	15	18	4	5	8	18	7	8	7	6	5	6
5	5	16	6	5	2	5	9	10	17	5	5	8	20	6	5	4	6	6	6
2	5	16	6	7	3	6	9	18	17	6	5	8	6	6	4	6	6	6	6
1	5	16	5	6	4	4	9	12	14	7	5	8	7	6	6	6	6	6	6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	6	3	15	14	1	6	14	12	11	1	7	12	9	9	6	7	6	9	7
2	6	3	31	30	2	6	14	7	22	1	7	11	19	18	5	7	6	10	10
1	6	3	11	9	4	6	14	9	22	2	7	11	7	7	4	7	6	25	24
0	6	4	3	5	5	6	14	4	1	3	7	11	10	8	3	7	6	13	12
1	6	4	33	34	1	6	15	8	38	4	7	11	13	12	2	7	6	19	18
2	6	4	39	38	4	6	15	9	14	5	7	11	6	5	1	7	6	33	34
3	6	4	18	14	3	6	15	6	5	6	7	11	4	2	0	7	5	35	35
4	6	4	6	4	4	6	15	6	27	7	7	11	5	5	0	7	5	10	6
5	6	4	22	19	0	6	15	16	6	19	7	10	8	7	1	7	5	27	28
6	6	4	9	9	1	6	16	4	8	4	7	10	16	19	2	7	5	34	38
7	6	4	11	12	2	6	16	6	19	4	7	10	7	7	3	7	5	21	20
8	6	4	7	6	3	6	17	3	11	1	7	10	16	15	4	7	5	7	7
9	6	4	5	5	0	6	17	7	17	0	7	10	21	22	5	7	5	18	19
9	6	5	6	7	0	6	20	4	8	0	7	9	9	11	6	7	5	11	9
7	6	5	5	7	0	6	21	5	18	1	7	9	19	16	7	5	5	8	9
6	6	5	17	17	5	7	17	4	7	2	7	9	9	8	9	7	5	3	2
5	6	5	13	13	3	7	17	5	9	3	7	9	7	7	7	7	4	7	7
4	6	5	11	9	2	7	16	6	5	4	7	9	8	8	6	7	4	11	10
3	6	5	12	10	1	7	16	6	12	5	7	9	6	4	5	7	4	11	10
2	6	5	31	27	0	7	15	7	11	6	7	9	7	9	4	7	4	23	20
1	6	5	40	38	1	7	15	9	15	7	7	8	7	8	3	7	4	29	29
0	6	5	7	7	2	7	15	6	4	7	7	8	6	5	2	7	4	18	18
0	6	6	10	9	4	7	15	5	8	5	7	8	7	6	1	7	4	34	33
1	6	6	15	16	4	7	14	9	10	4	7	8	14	10	0	7	4	38	38
2	6	6	16	14	3	7	14	6	12	3	7	8	8	5	0	7	4	32	33
3	6	6	15	14	0	7	14	6	5	2	7	8	16	15	1	7	3	9	9
4	6	6	18	14	0	7	14	9	8	1	7	8	16	14	2	7	3	27	26
5	6	6	8	8	0	7	13	4	8	0	7	8	6	6	3	7	3	14	10
6	6	6	10	10	2	7	13	11	7	1	7	7	13	12	4	7	3	28	27
7	6	6	8	7	3	7	13	7	8	2	7	7	12	12	5	7	3	10	8
8	6	6	7	7	4	7	13	7	6	3	7	7	11	12	6	7	3	11	10
7	6	6	6	7	5	7	13	6	8	4	7	7	6	4	7	7	3	7	5
6	6	6	13	11	6	7	12	6	11	5	7	7	6	5	7	7	3	6	7
5	6	6	14	14	1	7	12	9	11	6	7	7	13	13	8	7	3	6	6
4	6	6	16	19	0	7	12	18	19	6	7	7	18	18	9	7	2	10	11
3	6	6	18	19	0	7	12	6	7	8	7	7	6	5	7	7	2	6	6

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ISOCHAPLATRIN 1(B)

PAGE 6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
5	7	2	24	23	1	3	2	43	42	5	8	6	8	6	1	9	12	6	5
4	7	2	16	15	2	3	2	48	50	6	7	6	7	5	0	9	12	5	5
3	7	2	37	37	3	8	2	30	30	6	9	7	9	4	1	9	11	6	4
2	7	2	41	37	4	8	2	12	11	5	8	7	8	4	2	9	11	6	4
1	7	2	18	15	5	8	2	16	18	4	8	7	9	8	3	9	11	8	8
0	7	2	32	33	7	8	2	14	15	3	8	7	9	11	2	9	11	8	9
0	7	1	23	24	8	8	2	9	10	2	8	7	15	14	0	9	11	5	4
1	7	1	18	18	7	8	2	5	5	1	8	7	12	6	6	9	10	4	5
2	7	1	48	49	6	8	3	17	19	0	8	7	11	32	4	9	10	7	14
3	7	1	39	37	5	8	3	5	6	0	8	8	31	6	1	9	10	7	5
4	7	1	13	14	4	8	3	17	2	0	8	8	14	22	2	9	10	6	6
5	7	1	18	16	3	8	3	3	15	1	8	8	14	9	3	9	10	5	6
6	7	1	5	1	2	8	3	16	18	1	8	8	14	7	4	9	10	10	10
7	7	1	7	6	3	8	3	19	39	4	8	8	15	5	1	9	9	6	4
6	7	0	8	10	0	8	3	41	43	5	8	8	17	17	2	9	9	4	5
5	7	0	8	7	0	8	3	29	30	8	7	9	21	22	1	9	9	6	4
4	7	0	5	5	1	8	4	19	18	7	8	9	5	6	4	9	9	4	5
3	7	0	34	32	2	8	4	30	33	6	8	9	7	8	6	9	9	6	4
2	7	0	16	12	3	8	4	18	19	6	8	9	6	7	4	9	9	5	5
1	7	0	82	82	4	8	4	18	17	7	8	9	13	13	0	9	8	5	4
0	8	0	61	61	5	8	4	29	30	8	8	9	11	5	1	9	8	4	3
1	8	0	3	3	6	8	4	19	20	8	8	9	26	29	4	9	8	3	2
2	8	0	5	3	7	8	4	7	8	8	8	9	13	12	2	9	8	5	4
3	8	0	33	32	9	8	5	7	8	8	8	10	16	17	1	9	8	13	15
4	8	0	14	13	6	8	5	6	7	8	8	10	10	18	0	9	8	34	37
6	8	0	5	5	14	8	5	14	15	7	8	10	18	19	0	9	8	6	6
7	8	1	7	6	14	8	5	6	14	4	8	10	7	4	1	9	7	5	3
7	8	1	11	11	6	8	5	26	27	5	8	10	5	3	2	9	7	8	10
6	8	1	3	4	11	8	5	17	15	6	8	11	5	6	4	9	7	9	29
5	8	1	15	16	4	8	5	20	19	5	8	11	4	5	5	9	7	9	8
4	8	1	17	15	5	8	5	17	15	4	8	11	5	6	6	9	7	9	5
3	8	1	39	38	0	8	5	25	22	3	8	11	10	9	7	9	7	8	7
2	8	1	17	15	1	8	5	15	14	2	8	11	15	6	6	9	7	7	9
1	8	1	34	35	1	8	6	26	24	1	8	12	12	15	5	9	6	15	10
0	8	1	22	24	2	8	6	7	6	0	8	12	11	14	4	9	6	13	13
0	8	2	8	7	3	8	6	12	12	1	3	12	12	10	8	9	6	12	14

ISOCHAPLATRIN 1(B)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	9	6	14	14	1	9	1	33	32	1	9	1	33	32	3	10	8	6	7
2	9	6	11	11	1	9	1	10	13	2	10	9	10	32	7	10	9	4	4
1	9	6	18	18	3	9	1	27	25	0	10	3	27	30	6	10	9	4	4
0	9	6	11	12	4	9	1	14	12	0	10	4	14	21	11	10	9	12	11
0	9	5	35	37	1	9	1	11	12	1	10	4	11	12	16	9	9	16	14
1	9	5	14	15	6	9	0	21	21	2	10	4	21	13	11	10	9	11	7
2	9	5	21	20	5	9	0	14	16	3	10	4	14	11	0	10	9	6	4
3	9	5	9	10	4	9	0	4	6	4	10	4	4	12	11	0	10	5	3
4	9	5	6	6	3	9	0	35	36	5	10	4	35	11	1	10	10	17	18
5	9	5	13	12	2	9	0	62	61	6	10	4	62	8	2	10	10	8	6
6	9	5	9	8	1	9	0	24	25	7	10	5	24	7	3	10	10	8	5
8	9	5	4	2	0	10	0	31	31	7	10	5	31	8	6	10	10	6	5
7	9	4	9	11	1	10	0	9	6	6	10	5	9	15	9	10	11	5	4
5	9	4	9	7	3	10	0	7	8	5	10	11	7	18	5	10	11	8	5
4	9	4	11	11	4	10	0	7	8	4	10	11	7	16	4	10	11	5	4
3	9	4	23	24	6	10	0	9	8	3	10	11	9	16	3	10	11	8	8
2	9	4	15	13	8	10	1	7	7	2	10	11	7	14	1	10	11	5	7
1	9	4	36	35	7	10	1	6	7	1	10	11	6	16	8	11	12	7	7
0	9	4	21	22	6	10	1	13	15	0	10	12	13	34	15	12	12	12	11
0	9	3	33	32	5	10	1	15	16	0	10	12	15	20	10	12	10	10	7
1	9	3	15	14	4	10	1	9	8	1	10	12	9	10	5	11	12	6	7
2	9	3	15	10	3	10	1	11	9	2	10	12	11	7	6	12	12	8	7
3	9	3	8	8	1	10	1	43	43	3	10	13	43	9	5	10	13	5	4
4	9	3	22	22	1	10	1	8	5	4	10	13	8	17	17	10	13	5	7
5	9	3	11	10	1	10	1	26	26	5	10	13	26	7	3	10	13	5	3
6	9	3	15	15	0	10	2	22	22	2	10	13	22	23	6	10	13	11	7
7	9	3	5	4	1	10	2	14	14	3	10	13	14	9	14	10	13	6	6
7	9	2	6	7	2	10	2	23	22	4	10	13	23	29	13	10	13	14	8
6	9	2	12	10	2	10	2	11	9	7	10	14	11	17	7	10	14	7	5
5	9	2	11	11	2	10	2	8	9	9	10	14	8	21	7	10	14	7	6
4	9	2	17	18	2	10	2	7	7	6	10	14	7	20	9	10	14	8	9
3	9	2	21	22	3	10	3	6	15	18	10	14	6	17	3	10	14	13	3
2	9	2	15	15	6	10	3	15	7	22	10	15	15	11	4	10	15	7	3
1	9	2	12	11	5	10	3	7	15	11	10	15	7	9	5	10	15	5	5
0	9	1	38	37	4	10	3	13	13	8	10	15	13	6	2	10	15	8	3
0	9	1	61	61	3	10	3	18	17	6	10	15	18	5	7	10	15	19	20

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	11	9	7	7	3	11	3	28	28	3	12	1	8	8	6	12	6	4	4
4	11	9	15	15	4	11	3	10	10	2	12	1	19	18	8	12	7	3	4
6	11	9	10	11	5	11	3	12	14	1	12	1	9	9	5	12	7	13	13
5	11	8	7	6	6	11	3	6	7	0	12	1	8	7	4	12	7	12	10
4	11	8	16	17	3	11	3	5	5	1	12	2	7	10	7	12	7	9	8
3	11	8	13	11	2	11	2	9	10	2	12	2	4	4	7	12	7	15	15
2	11	8	9	6	2	11	2	13	14	3	12	2	9	9	7	12	7	8	7
1	11	8	8	7	4	11	2	10	9	4	12	2	9	9	7	12	7	5	6
0	11	7	7	8	3	11	2	12	10	5	12	2	12	13	0	12	7	5	6
1	11	7	18	20	2	11	2	10	8	6	12	2	8	8	1	12	8	8	5
2	11	7	10	9	1	11	2	40	40	7	12	3	8	9	2	12	8	10	4
3	11	7	10	6	0	11	2	18	20	5	12	3	5	5	3	12	8	5	8
4	11	7	15	15	0	11	1	22	25	4	12	3	11	11	4	12	14	12	12
5	11	7	8	7	1	11	1	23	22	3	12	3	7	4	7	12	8	5	4
7	11	6	10	10	2	11	1	9	8	2	12	3	15	15	5	12	9	14	6
6	11	6	7	6	3	11	1	8	6	1	12	3	7	4	6	12	8	5	6
5	11	6	4	4	4	11	1	9	8	0	12	4	13	12	5	12	6	7	5
4	11	6	16	17	5	11	1	17	18	0	12	4	12	12	1	12	13	12	16
3	11	6	10	10	6	11	1	13	13	1	12	4	12	12	2	12	13	13	14
2	11	6	13	16	8	11	1	7	7	2	12	4	10	11	0	12	9	13	12
1	11	6	16	17	7	11	0	4	3	3	12	4	6	6	0	12	10	4	12
0	11	5	8	4	6	11	0	11	10	4	12	4	14	15	1	12	13	4	12
0	11	5	10	6	5	11	0	13	13	6	12	5	10	9	2	12	10	13	9
1	11	5	7	4	4	11	0	29	28	7	12	5	7	7	3	12	10	5	10
2	11	5	17	18	3	11	0	24	24	4	12	5	20	18	4	12	5	3	12
3	11	5	31	32	2	11	0	22	21	3	12	5	6	5	5	12	8	3	13
4	11	5	11	11	1	11	0	39	41	2	12	5	18	18	4	12	5	4	13
5	11	5	12	11	0	11	0	9	9	1	12	5	11	12	2	12	11	5	13
5	11	4	10	9	1	11	0	6	6	0	12	5	2	4	1	12	11	4	13
4	11	4	17	17	2	11	0	6	6	0	12	5	3	3	0	12	11	3	13
3	11	4	7	5	5	11	0	6	7	1	12	6	7	5	1	12	12	5	13
2	11	4	11	11	6	11	0	8	10	1	12	6	20	22	1	12	6	6	13
1	11	4	10	11	7	11	1	6	6	2	12	6	22	22	2	12	12	13	13
0	11	4	48	48	6	11	1	7	9	3	12	6	25	20	6	12	12	5	13
1	11	3	17	14	1	11	1	21	21	4	12	6	12	13	5	12	13	4	13
2	11	3	14	14	4	11	1	24	24	5	12	6	6	5	2	12	13	3	13

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ISOCHAPLIATRIN 1(B)

H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC
6	13	8	5	4	1	14	1	10	12	4	14	7	7	6	0	15	11	9	6
4	13	8	11	10	0	14	1	10	10	3	14	7	10	10	1	15	11	5	4
3	13	8	6	4	0	14	2	24	24	2	14	7	15	15	2	15	10	13	14
1	13	8	13	8	1	14	2	5	5	1	14	7	11	8	1	15	10	9	8
1	13	7	9	15	2	14	2	17	17	0	14	7	10	8	0	15	10	9	8
2	13	7	13	12	3	14	2	12	12	0	14	8	18	18	1	15	9	9	5
3	13	7	16	4	4	14	2	16	17	1	14	8	10	9	2	15	9	9	9
4	13	7	6	3	5	14	2	6	5	2	14	8	9	9	3	15	9	10	9
5	13	7	9	10	6	14	2	5	6	3	14	8	12	13	4	15	9	7	4
6	13	7	5	11	7	14	3	4	4	4	14	8	7	6	6	15	8	5	5
6	13	6	5	15	5	14	3	6	6	7	14	8	8	8	4	15	8	4	3
6	13	6	7	16	0	13	1	10	10	4	14	8	7	7	3	15	8	4	3
5	13	6	20	18	1	13	1	13	13	4	14	9	8	7	2	15	8	11	13
4	13	6	9	7	3	14	3	12	13	3	14	9	8	8	1	15	8	16	17
3	13	6	21	22	2	14	3	9	10	2	14	9	8	7	0	15	8	7	6
1	13	6	13	16	0	14	3	17	16	1	14	9	5	7	1	15	7	17	5
0	13	6	8	9	0	14	4	8	7	0	14	10	5	6	1	15	7	17	17
1	13	5	8	7	1	14	4	8	7	4	14	10	5	6	2	15	7	6	6
2	13	5	5	18	2	14	4	8	4	1	14	11	8	5	3	15	7	9	8
3	13	5	12	24	4	14	4	5	5	0	14	11	6	5	4	15	7	5	6
4	13	5	11	23	4	14	4	10	9	0	14	11	5	5	6	15	7	6	6
5	13	5	11	30	5	14	4	7	7	0	14	11	8	4	5	15	6	6	8
6	13	5	6	3	7	14	5	3	3	1	14	12	6	6	4	15	6	9	9
7	13	5	8	35	6	14	5	5	5	2	14	12	4	4	4	15	6	6	7
5	13	4	5	11	5	14	5	8	7	5	14	13	4	3	3	15	5	4	6
4	13	4	9	7	4	14	5	7	8	2	14	13	7	7	0	15	5	4	5
3	13	4	19	27	3	14	5	23	25	0	14	13	4	3	1	15	5	13	13
2	13	4	11	24	2	14	5	5	3	2	14	14	5	6	2	15	5	10	9
1	13	4	4	18	1	14	5	9	8	0	14	15	6	6	4	15	5	6	6
0	13	4	15	6	0	14	6	7	4	1	14	16	6	2	6	15	5	10	11
0	13	3	8	6	0	14	6	10	9	0	15	16	5	3	6	15	5	5	6
1	13	3	13	10	1	14	6	13	9	0	15	16	4	2	6	15	4	6	7
2	13	3	7	8	2	14	6	13	13	2	15	13	5	4	5	15	4	7	7
3	13	3	10	5	3	14	6	16	17	5	15	12	5	5	4	15	4	8	8
4	13	3	10	13	4	14	6	15	16	2	15	12	4	2	3	15	4	9	8
5	13	3	10	3	5	14	6	15	4	1	15	12	7	7	1	15	3	22	23
5	13	3	10	9	7	14	6	7	4	0	15	12	4	5	0	15	3	7	5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	19	11	4	4	0	20	2	10	9	4	21	5	5	4
2	19	10	5	5	1	20	2	8	8	1	21	4	5	5
0	19	10	6	6	2	20	3	8	7	3	21	3	4	4
0	19	9	3	3	1	20	4	5	5	5	21	2	5	5
1	19	9	6	8	5	20	4	5	4	3	21	2	8	4
2	19	9	6	5	3	20	5	5	4	1	21	2	5	4
3	19	8	4	3	2	20	5	4	4	1	21	1	4	3
1	19	8	6	6	1	20	5	8	6	5	21	1	8	3
0	19	8	7	7	0	20	6	6	6	4	21	0	4	4
0	19	7	6	5	0	20	6	6	5	3	21	0	5	7
1	19	7	13	13	1	20	6	4	4	2	21	0	6	6
2	19	7	3	4	3	20	8	7	7	0	22	0	6	5
3	19	7	5	4	4	20	12	5	3	2	22	0	6	7
2	19	6	5	5	3	21	10	6	6	0	22	1	8	4
0	19	5	10	10	3	21	8	4	4	0	22	2	4	6
1	19	5	7	9	0	21	8	4	4	1	22	2	4	4
2	19	5	9	9	2	21	7	4	4	2	22	2	5	5
4	19	4	5	4	3	21	7	5	5	3	22	2	6	3
3	19	4	6	5	3	21	6	4	4	2	22	3	6	6
2	19	4	7	7	1	21	6	4	4	2	22	3	9	7
1	19	4	11	9	1	21	5	6	5	2	22	4	7	5
0	19	4	7	6	2	21	5	6	6	5	22	4	5	8

END OF LISTING OF FILE :GACA17-HUMPHY(1,*2)-PRINT(3) FOR USER GACA17 AT 1980/01/17__22:38:53

Acetylchaptiatrin (Ic)

Crystal data

Acetylchaptiatrin, $C_{25}H_{32}O_{11}$, $M_r = 508.5$, monoclinic, $a = 34.836(3)$,
 $b = 13.648(2)$, $c = 16.970(2)$ Å, $\beta = 138.32(8)^\circ$, $U = 5367.31$ Å³,
 $D_m = 1.26$, $D_c = 1.26$ Mg m⁻³, $Z = 8$, $F(000) = 2160$, space group C2,
 $\mu(\text{Mo-K}\alpha) = 1.07$ cm⁻¹.

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	0	1	24	25	-4	0	5	32	32	-8	0	6	96	85	-12	0	2	198	179
0	0	2	63	53	-4	0	4	131	95	-8	0	5	26	29	-12	0	1	59	55
0	0	4	56	36	-4	0	3	19	13	-8	0	4	330	514	12	0	0	30	38
0	0	5	11	12	-4	0	2	203	284	-8	0	3	66	58	12	0	1	11	10
0	0	6	12	13	-4	0	1	38	32	-8	0	2	210	241	12	0	2	53	63
0	0	8	31	16	4	0	0	237	288	-8	0	1	14	14	12	0	4	19	17
0	0	9	16	14	4	0	1	12	12	8	0	0	54	58	12	0	6	32	33
0	0	12	16	16	4	0	2	141	137	8	0	2	203	194	-14	0	16	24	20
-2	0	13	15	12	4	0	4	28	21	8	0	4	109	120	-14	0	15	20	21
-2	0	11	17	19	4	0	5	21	20	8	0	16	16	10	-14	0	13	15	12
-2	0	10	22	22	4	0	6	23	25	-10	0	14	18	17	-14	0	11	15	16
-2	0	8	142	156	4	0	8	14	16	-10	0	13	22	18	-14	0	10	85	77
-2	0	7	11	12	4	0	10	32	34	-10	0	12	14	15	-14	0	9	66	66
-2	0	6	24	28	-6	0	13	23	26	-10	0	11	16	19	-14	0	8	226	220
-2	0	5	19	5	-6	0	12	23	25	-10	0	10	82	82	-14	0	7	24	28
-2	0	4	284	306	-6	0	10	46	46	-10	0	9	39	28	-14	0	6	104	88
-2	0	3	9	8	-6	0	9	32	34	-10	0	8	78	82	-14	0	5	19	19
-2	0	2	138	140	-6	0	8	41	44	-10	0	7	60	57	-14	0	4	33	20
-2	0	1	48	0	-6	0	7	11	12	-10	0	6	346	420	-14	0	3	30	29
2	0	0	92	67	-6	0	6	75	78	-10	0	4	326	421	-14	0	2	70	70
2	0	1	13	9	-6	0	5	23	22	-10	0	2	122	111	-14	0	1	14	13
2	0	2	136	154	-6	0	4	173	167	-10	0	1	9	8	14	0	0	30	25
2	0	3	8	9	-6	0	2	76	50	10	0	0	113	100	14	0	4	53	56
2	0	4	226	213	6	0	0	73	45	10	0	2	153	160	-16	0	14	17	14
2	0	5	20	17	6	0	1	8	7	10	0	6	59	61	-16	0	13	34	33
2	0	6	84	87	6	0	2	51	46	-12	0	16	30	31	-16	0	12	50	46
2	0	7	28	30	6	0	4	47	57	-12	0	15	19	22	-16	0	11	44	53
2	0	8	46	44	6	0	5	16	15	-12	0	14	52	53	-16	0	10	11	10
2	0	9	15	14	6	0	6	39	33	-12	0	12	15	17	-16	0	9	70	64
2	0	10	37	40	6	0	12	21	23	-12	0	11	20	16	-16	0	8	103	92
2	0	12	22	19	-8	0	15	18	15	-12	0	9	33	31	-16	0	7	17	15
-4	0	16	20	17	-8	0	14	42	41	-12	0	8	211	211	-16	0	6	24	23
-4	0	12	19	20	-8	0	13	38	40	-12	0	7	49	45	-16	0	5	33	31
-4	0	11	15	17	-8	0	12	47	50	-12	0	6	64	56	-16	0	4	13	13
-4	0	10	21	17	-8	0	8	65	69	-12	0	5	13	11	-16	0	3	125	117
-4	0	6	99	106	-8	0	7	28	30	-12	0	4	120	88	16	0	0	51	46

ACETYLCHAPLATRIN 1(C)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 2

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-22	0	4	91	91	-30	0	14	42	44	1	1	1	156	153	-5	1	5	158	149
22	0	0	26	27	-30	0	10	24	23	1	1	2	39	39	-5	1	4	67	70
-24	0	17	18	17	-30	0	9	24	26	1	1	3	114	109	-5	1	3	101	89
-24	0	15	21	23	-30	0	8	56	55	1	1	4	38	35	-5	1	2	89	83
-24	0	12	54	51	-30	0	7	28	32	1	1	5	54	46	-5	1	1	123	114
-24	0	11	15	16	-30	0	5	15	13	1	1	6	39	40	5	1	0	98	108
-24	0	9	19	19	-30	0	4	19	19	1	1	7	63	59	5	1	1	46	33
-24	0	8	64	65	-32	0	18	19	17	1	1	12	17	16	5	1	2	66	57
-24	0	7	39	38	-32	0	14	30	31	-3	1	12	24	22	5	1	3	138	133
-24	0	6	72	71	-32	0	12	18	20	-3	1	10	16	18	5	1	4	18	17
-24	0	3	27	30	-32	0	11	28	26	-3	1	9	43	40	5	1	5	39	38
-24	0	2	28	25	-32	0	10	28	27	-3	1	8	55	61	5	1	6	46	45
24	0	0	27	28	-32	0	9	31	27	-3	1	7	64	67	5	1	7	29	33
24	0	2	21	23	-32	0	8	23	22	-3	1	6	34	35	5	1	8	38	39
-26	0	17	25	21	-32	0	4	21	22	-7	1	15	126	120	-7	1	15	17	19
-26	0	16	19	19	-32	0	2	16	18	-7	1	13	60	52	-7	1	13	23	20
-26	0	15	17	20	-34	0	14	18	17	-7	1	12	15	24	-7	1	12	28	26
-26	0	13	34	33	-34	0	13	24	23	-7	1	10	136	135	-7	1	10	22	20
-26	0	12	39	34	-34	0	11	15	14	-7	1	9	104	114	-7	1	9	39	41
-26	0	11	21	23	-34	0	9	17	13	-7	1	8	172	183	-7	1	8	25	21
-26	0	10	39	40	-36	0	14	21	20	3	1	1	112	127	-7	1	7	26	29
-26	0	9	17	16	-38	0	6	22	22	3	1	2	78	73	-7	1	6	102	96
-26	0	8	51	58	-40	0	9	21	20	3	1	3	38	37	-7	1	5	171	161
-26	0	7	19	21	-44	0	19	18	15	3	1	4	34	40	-7	1	4	99	102
-26	0	6	27	23	-1	1	11	28	30	3	1	5	45	49	-7	1	3	182	197
-26	0	4	38	35	-1	1	10	25	26	3	1	6	29	24	-7	1	2	57	58
-28	0	16	22	23	-1	1	9	24	24	3	1	7	38	39	-7	1	1	38	33
-28	0	15	22	23	-1	1	8	48	48	3	1	9	28	27	7	1	0	36	22
-28	0	14	42	38	-1	1	7	38	40	3	1	11	20	16	7	1	1	46	53
-28	0	13	39	40	-1	1	6	57	54	3	1	13	25	24	7	1	2	151	140
-28	0	11	17	16	-1	1	5	19	22	-5	1	12	30	35	7	1	3	20	21
-28	0	10	30	34	-1	1	4	105	112	-5	1	10	16	17	7	1	4	45	42
-28	0	8	28	30	-1	1	3	10	16	-5	1	9	55	53	7	1	5	62	58
-28	0	7	28	30	-1	1	2	62	52	-5	1	8	14	10	7	1	6	22	18
-30	0	18	20	21	-1	1	1	156	182	-5	1	7	24	18	7	1	7	50	50
-30	0	16	16	14	-1	1	0	159	193	-5	1	6	65	57	-9	1	15	23	22

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
11	1	1	41	36	-15	1	3	17	16	-19	1	3	42	42	-25	1	16	19	22
11	1	2	16	15	-15	1	2	63	48	-19	1	2	30	30	-25	1	15	15	15
11	1	3	43	39	-15	1	1	57	63	-19	1	1	40	40	-25	1	14	29	34
11	1	4	28	29	15	1	0	64	65	19	1	0	29	30	-25	1	13	23	23
11	1	5	25	29	15	1	1	26	27	19	1	1	19	21	-25	1	12	33	30
11	1	6	46	51	15	1	4	30	28	19	1	2	17	16	-25	1	10	22	20
-13	1	15	16	14	15	1	5	20	20	-21	1	15	23	21	-25	1	9	37	41
-13	1	14	21	23	15	1	6	16	14	-21	1	14	22	22	-25	1	8	21	24
-13	1	13	32	31	-17	1	14	17	11	-21	1	13	35	37	-25	1	7	28	21
-13	1	12	33	32	-17	1	13	43	44	-21	1	12	38	36	-25	1	6	35	36
-13	1	11	45	47	-17	1	11	55	53	-21	1	11	49	47	-25	1	5	28	25
-13	1	10	22	24	-17	1	9	55	64	-21	1	9	43	43	-25	1	4	36	36
-13	1	9	38	37	-17	1	8	71	55	-21	1	7	37	35	-25	1	3	26	26
-13	1	8	74	74	-17	1	7	53	55	-21	1	6	42	41	-25	1	2	24	24
-13	1	7	69	70	-17	1	6	49	41	-21	1	5	29	27	25	1	1	18	14
-13	1	6	120	118	-17	1	5	47	41	-21	1	4	14	13	-27	1	16	23	27
-13	1	5	29	29	-17	1	4	38	31	-21	1	3	45	46	-27	1	13	17	18
-13	1	4	74	80	-17	1	3	45	34	-21	1	2	38	39	-27	1	12	27	30
-13	1	3	117	109	-17	1	2	91	95	-21	1	1	29	30	-27	1	11	20	21
-13	1	2	50	46	-17	1	1	51	47	21	1	0	30	33	-27	1	9	17	19
-13	1	1	21	24	17	1	0	20	24	-23	1	16	18	16	-27	1	8	51	54
13	1	0	20	19	17	1	1	42	43	-23	1	15	20	22	-27	1	7	41	37
13	1	1	38	36	17	1	2	16	17	-23	1	14	21	27	-27	1	6	18	17
13	1	2	14	14	17	1	3	22	22	-23	1	13	17	14	-27	1	5	16	16
13	1	3	14	14	17	1	5	16	15	-23	1	12	49	46	-27	1	4	25	21
13	1	5	37	43	-19	1	15	27	25	-23	1	11	20	16	-27	1	3	39	42
-15	1	18	16	15	-19	1	13	74	79	-23	1	19	30	33	-29	1	19	21	22
-15	1	13	14	13	-19	1	12	28	26	-23	1	16	37	37	-29	1	16	15	18
-15	1	11	46	45	-19	1	11	13	14	-23	1	15	22	23	-29	1	15	42	40
-15	1	10	49	43	-19	1	10	67	66	-23	1	14	18	14	-29	1	14	20	23
-15	1	9	38	45	-19	1	9	40	31	-23	1	12	38	34	-29	1	12	26	28
-15	1	8	52	46	-19	1	8	31	35	-23	1	10	13	15	-29	1	10	47	46
-15	1	7	96	93	-19	1	7	59	54	-23	1	8	26	27	-29	1	8	34	36
-15	1	6	104	95	-19	1	6	20	19	-23	1	7	46	42	-29	1	7	35	35
-15	1	5	75	69	-19	1	5	59	54	-23	1	2	16	18	-31	1	18	17	15
-15	1	4	59	58	-19	1	4	38	38	-23	1	1	29	27	-31	1	17	15	15

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	2	2	39	34	-6	2	7	78	79	-10	2	10	20	17	-14	2	13	41	41
-2	2	1	114	140	-6	2	6	47	48	-10	2	7	98	91	-14	2	12	31	37
2	2	0	21	20	-6	2	5	166	155	-10	2	6	36	36	-14	2	11	21	22
2	2	1	341	506	-6	2	4	36	28	-10	2	5	246	249	-14	2	10	30	23
2	2	2	14	16	-6	2	3	212	235	-10	2	4	53	49	-14	2	9	42	42
2	2	3	187	158	-6	2	2	44	47	-10	2	3	81	90	-14	2	8	46	50
2	2	4	18	15	-6	2	1	221	235	-10	2	2	22	17	-14	2	7	68	72
2	2	5	107	102	6	2	0	16	16	-10	2	1	23	15	-14	2	6	36	35
2	2	7	48	47	6	2	1	177	172	-10	2	0	15	14	-14	2	5	36	33
2	2	9	33	33	6	2	3	80	86	10	2	1	102	71	-14	2	4	32	31
2	2	11	16	15	6	2	4	18	15	10	2	3	77	75	-14	2	3	70	54
-4	2	13	24	22	6	2	5	33	29	10	2	4	17	15	-14	2	2	16	16
-4	2	12	18	21	6	2	7	19	16	10	2	5	85	88	-14	2	1	121	115
-4	2	11	25	24	6	2	9	30	34	10	2	7	31	29	14	2	0	14	15
-4	2	10	22	25	6	2	17	17	14	-12	2	17	19	17	14	2	2	16	17
-4	2	8	17	16	-8	2	15	20	18	-12	2	16	18	12	14	2	3	48	52
-4	2	7	77	76	-8	2	13	25	24	-12	2	15	16	14	-16	2	15	22	20
-4	2	6	29	32	-8	2	12	19	17	-12	2	13	30	29	-16	2	14	29	26
-4	2	5	71	59	-8	2	11	42	44	-12	2	12	18	19	-16	2	13	23	25
-4	2	4	43	43	-8	2	9	35	27	-12	2	11	58	56	-16	2	12	34	36
-4	2	3	294	397	-8	2	8	26	27	-12	2	10	34	34	-16	2	11	38	34
-4	2	2	36	37	-8	2	7	69	59	-12	2	9	85	74	-16	2	9	95	98
-4	2	1	128	140	-8	2	6	31	30	-12	2	8	31	31	-16	2	8	64	63
4	2	0	21	26	-8	2	5	140	143	-12	2	7	88	87	-16	2	7	75	62
4	2	1	175	151	-8	2	4	24	25	-12	2	6	32	30	-16	2	6	46	48
4	2	2	13	15	-8	2	3	90	65	-12	2	5	168	164	-16	2	5	94	86
4	2	3	107	84	-8	2	2	28	24	-12	2	4	21	17	-16	2	4	41	39
4	2	4	21	21	-8	2	1	33	19	-12	2	3	56	47	-16	2	3	84	86
4	2	5	109	104	8	2	0	10	9	-12	2	2	26	20	-16	2	2	40	39
4	2	6	18	17	8	2	1	119	96	-12	2	1	110	82	-16	2	1	25	25
4	2	7	38	43	8	2	2	10	10	12	2	0	32	30	16	2	0	14	17
4	2	8	19	19	8	2	3	85	67	12	2	1	37	35	16	2	1	24	24
4	2	9	38	36	8	2	5	56	57	12	2	3	52	57	16	2	3	28	31
-6	2	11	18	18	8	2	7	30	30	12	2	5	32	35	16	2	14	29	28
-6	2	10	45	38	-10	2	12	26	25	12	2	7	29	29	-18	2	13	22	20
-6	2	9	27	28	-10	2	11	55	51	-14	2	15	15	10	-18	2	12	21	21

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ACETYLCHAPLATRIN 1(C)

PAGE 5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-22	2	6	23	25	-30	2	14	33	34	1	3	9	28	29	5	3	1	34	49	-9	3	4	139	136
-22	2	5	27	26	-30	2	13	30	31	1	3	11	24	22	5	3	2	74	70	-9	3	3	82	73
-22	2	3	35	34	-30	2	12	41	46	-3	3	12	27	28	5	3	3	106	93	-9	3	2	103	107
-22	2	1	25	23	-30	2	11	21	18	-3	3	11	15	15	5	3	4	18	18	-9	3	1	89	85
22	2	1	19	21	-30	2	10	23	25	-3	3	10	53	51	5	3	5	14	16	9	3	0	60	54
-24	2	18	18	19	-30	2	7	15	14	-3	3	9	18	16	5	3	6	58	54	9	3	1	53	49
-24	2	15	18	14	-30	2	6	16	16	-3	3	8	26	22	5	3	7	14	15	9	3	2	61	53
-24	2	11	29	26	-30	2	5	34	31	-3	3	7	44	45	5	3	8	30	33	9	3	3	55	56
-24	2	9	29	30	-32	2	13	19	22	-3	3	6	81	72	5	3	9	16	15	9	3	4	17	18
-24	2	7	16	15	-32	2	10	18	19	-3	3	5	91	91	-7	3	15	19	14	9	3	5	18	18
-24	2	6	13	12	-32	2	9	29	31	-3	3	4	42	49	-7	3	13	32	30	9	3	6	20	21
-24	2	5	27	26	-32	2	8	17	15	-3	3	3	46	53	-7	3	11	23	24	9	3	7	21	22
-24	2	4	23	21	-34	2	11	29	29	-3	3	2	116	110	-7	3	10	37	38	9	3	8	18	23
-24	2	2	15	13	-34	2	10	25	26	-3	3	1	91	78	-7	3	9	12	12	9	3	15	20	24
-24	2	2	15	13	-34	2	9	34	33	3	3	0	155	161	-7	3	8	46	39	-11	3	12	35	34
-26	2	15	22	21	-34	2	16	17	16	3	3	1	36	37	-7	3	7	54	45	-11	3	10	61	63
-26	2	13	17	19	-36	2	13	18	18	3	3	2	112	106	-7	3	6	56	58	-11	3	9	33	31
-26	2	12	35	36	-36	2	10	38	37	3	3	3	49	47	-7	3	5	58	55	-11	3	8	75	69
-26	2	10	13	15	-36	2	9	28	33	3	3	4	93	76	-7	3	4	13	12	-11	3	7	49	52
-26	2	7	25	26	-1	3	9	26	24	3	3	3	38	38	-7	3	3	63	67	-11	3	6	76	79
-26	2	6	29	32	-1	3	8	26	22	3	3	2	60	57	-7	3	2	26	33	-11	3	5	84	93
-26	2	5	49	57	-1	3	7	14	12	3	3	1	51	47	-7	3	1	41	46	-11	3	4	164	164
-26	2	4	20	21	-1	3	6	26	22	3	3	0	21	25	7	3	0	91	87	-11	3	3	65	64
-26	2	3	46	49	-1	3	5	62	61	3	3	9	16	17	7	3	1	59	54	-11	3	2	105	105
26	2	1	16	14	-1	3	4	124	122	3	3	13	16	14	7	3	2	95	84	-11	3	1	59	48
-28	2	15	28	27	-1	3	3	34	33	-5	3	11	26	23	7	3	3	66	58	11	3	0	62	52
-28	2	14	25	25	-1	3	2	153	165	-5	3	10	61	60	7	3	4	49	46	11	3	1	36	32
-28	2	13	16	17	-1	3	1	40	48	-5	3	9	21	23	7	3	6	30	30	11	3	2	66	63
-28	2	12	29	30	1	3	0	52	36	-5	3	8	28	24	7	3	7	31	32	11	3	3	33	32
-28	2	11	23	19	1	3	1	142	137	-5	3	7	29	28	-9	3	14	27	27	11	3	4	33	31
-28	2	10	41	36	1	3	2	30	32	-5	3	6	87	84	-9	3	11	17	19	11	3	6	23	27
-28	2	9	64	65	1	3	3	113	106	-5	3	5	54	60	-9	3	9	37	33	-13	3	17	19	16
-28	2	8	27	28	1	3	4	55	50	-5	3	4	50	36	-9	3	8	81	84	-13	3	15	19	23
-28	2	7	24	22	1	3	5	42	31	-5	3	3	85	98	-9	3	7	63	53	-13	3	14	16	17
-28	2	6	21	22	1	3	6	54	56	-5	3	2	85	93	-9	3	6	28	28	-13	3	13	24	25
-30	2	5	16	17	1	3	7	32	28	5	3	1	85	93	-9	3	5	105	101	-13	3	12	25	26

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ACETYLCHAPTATIN 1(C)

PAGE 6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-13	3	11	56	56	-17	3	13	34	39	-21	3	7	35	35	-29	3	16	18	18
-13	3	9	27	25	-17	3	12	28	28	-21	3	6	50	47	-29	3	15	16	13
-13	3	8	40	42	-17	3	11	27	27	-21	3	5	22	21	-29	3	14	20	20
-13	3	7	20	18	-17	3	10	21	24	-21	3	4	35	38	-29	3	13	14	14
-13	3	6	58	51	-17	3	9	51	46	-21	3	3	35	38	-29	3	12	47	49
-13	3	5	48	44	-17	3	8	72	82	-21	3	2	21	21	-29	3	10	27	25
-13	3	4	76	74	-17	3	7	99	86	-23	3	16	20	20	-29	3	8	43	44
-13	3	3	48	40	-17	3	6	21	18	-23	3	14	14	21	-29	3	7	16	17
-13	3	2	38	32	-17	3	5	22	23	-23	3	12	38	38	-29	3	6	15	14
-13	3	1	102	96	-17	3	4	82	80	-23	3	11	43	45	-31	3	17	16	14
13	3	0	61	58	-17	3	3	21	21	-23	3	10	27	28	-31	3	16	17	17
13	3	1	24	21	-17	3	2	32	30	-23	3	6	31	29	-31	3	14	16	14
13	3	4	38	39	-17	3	1	48	48	-23	3	5	39	41	-31	3	12	25	25
13	3	5	28	28	17	3	0	29	30	-23	3	3	14	13	-31	3	11	18	24
13	3	6	16	19	17	3	1	34	33	-23	3	2	28	24	-31	3	10	31	30
-15	3	17	18	18	17	3	2	44	45	-23	3	1	28	30	-31	3	9	32	33
-15	3	15	27	30	-19	3	14	19	23	-25	3	14	15	15	-31	3	8	17	18
-15	3	14	19	21	-19	3	11	17	17	-25	3	12	34	35	-33	3	11	27	28
-15	3	13	33	32	-19	3	10	52	58	-25	3	11	23	20	-33	3	10	37	38
-15	3	12	46	44	-19	3	9	14	12	-25	3	10	22	19	-33	3	9	24	22
-15	3	11	44	43	-19	3	8	84	86	-25	3	9	18	17	-33	3	8	19	19
-15	3	10	23	20	-19	3	7	45	39	-25	3	8	17	22	-33	3	5	16	16
-15	3	9	21	24	-19	3	6	71	71	-25	3	7	17	16	-33	3	3	18	11
-15	3	8	42	44	-19	3	5	53	50	-25	3	6	41	41	-35	3	18	23	20
-15	3	7	88	81	-19	3	4	18	18	-25	3	5	34	33	-35	3	15	19	16
-15	3	6	29	24	-19	3	3	33	30	-25	3	3	37	37	-35	3	13	16	16
-15	3	5	22	21	-19	3	2	60	68	-27	3	15	20	20	-35	3	11	28	12
-15	3	4	67	57	19	3	0	15	15	-27	3	14	23	28	-35	3	8	26	25
-15	3	3	28	24	19	3	2	24	22	-27	3	13	27	29	-35	3	10	23	25
-15	3	2	93	84	-21	3	16	23	22	-27	3	12	20	20	-37	3	16	19	14
-15	3	1	51	45	-21	3	14	20	20	-27	3	11	26	26	-43	3	10	23	25
15	3	0	17	17	-21	3	13	18	19	-27	3	10	36	40	0	4	0	93	72
15	3	3	49	51	-21	3	11	19	16	-27	3	9	23	20	0	4	2	128	120
15	3	4	17	18	-21	3	10	71	76	-27	3	7	23	21	0	4	3	13	13
-17	3	18	16	13	-21	3	9	15	13	-27	3	6	22	21	0	4	4	85	85
-17	3	15	16	18	-21	3	8	36	34	-27	3	4	47	47	0	4	5	26	26

ACETYLCHAPLATRIN 1(C)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 7

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
4	4	6	52	55	8	4	3	21	20	12	4	4	41	48	-18	4	17	23	19
4	4	8	35	36	8	4	4	66	61	12	4	6	23	23	-18	4	15	20	24
4	4	12	19	20	8	4	6	21	18	-14	4	14	25	28	-18	4	12	28	30
-6	4	13	15	15	8	4	8	19	20	-14	4	13	14	15	-18	4	10	53	55
-6	4	12	45	46	-10	4	14	20	19	-14	4	12	32	31	-18	4	9	23	27
-6	4	10	29	29	-10	4	13	20	23	-14	4	8	18	22	-18	4	12	14	12
-6	4	8	15	14	-10	4	12	28	28	-14	4	6	73	72	-18	4	11	17	16
-6	4	6	52	36	-10	4	11	13	12	-14	4	5	44	40	-18	4	10	24	25
-6	4	5	30	28	-10	4	10	25	25	-14	4	4	25	28	-24	4	8	18	21
-6	4	4	54	49	-10	4	9	27	30	-14	4	3	14	14	-24	4	6	16	17
-6	4	2	100	112	-10	4	8	33	30	-14	4	2	17	21	-24	4	5	20	20
-6	4	1	23	23	-10	4	7	36	38	-14	4	1	52	50	-24	4	2	17	20
6	4	0	101	103	-10	4	6	23	22	-14	4	0	18	18	-26	4	14	41	41
6	4	1	10	10	-10	4	5	16	18	-14	4	2	16	16	-26	4	13	38	46
6	4	2	29	31	-10	4	4	19	12	-14	4	1	13	14	-26	4	12	24	23
6	4	3	14	14	-10	4	3	13	14	-14	4	0	12	12	-26	4	10	23	25
6	4	4	21	16	-10	4	2	147	147	14	4	1	16	17	-26	4	9	29	30
6	4	5	19	18	-10	4	1	23	21	14	4	0	22	23	-26	4	8	16	37
6	4	6	19	18	10	4	0	59	41	14	4	3	27	29	-26	4	7	24	24
6	4	7	23	20	10	4	2	70	60	-16	4	16	23	24	-26	4	6	21	24
6	4	8	47	50	10	4	5	17	18	-16	4	13	14	16	-26	4	4	53	53
-8	4	14	25	25	10	4	6	16	16	-16	4	12	28	28	-28	4	15	19	18
-8	4	12	19	20	-12	4	15	15	15	-16	4	11	21	19	-28	4	14	24	25
-8	4	10	22	15	-12	4	12	28	30	-16	4	10	25	52	-28	4	13	31	33
-8	4	9	25	25	-12	4	11	20	19	-16	4	9	38	37	-28	4	12	28	31
-8	4	8	49	42	-12	4	10	28	27	-16	4	8	23	32	-28	4	11	19	18
-8	4	7	20	22	-12	4	9	12	12	-16	4	7	23	32	-28	4	10	19	18
-8	4	6	103	100	-12	4	8	43	44	-16	4	6	48	47	-28	4	9	18	16
-8	4	5	50	51	-12	4	7	42	40	-16	4	5	39	34	-28	4	8	24	27
-8	4	4	44	44	-12	4	6	62	65	-16	4	4	32	30	-28	4	7	20	20
-8	4	3	13	15	-12	4	4	56	50	-16	4	3	18	18	-28	4	6	42	45
-8	4	2	76	54	-12	4	3	12	11	-16	4	2	15	14	-28	4	4	34	38
-8	4	1	28	28	-12	4	2	35	30	-16	4	1	20	20	-28	4	2	18	18
8	4	0	68	62	12	4	0	15	15	16	4	0	16	14	-30	4	1	19	19
8	4	1	13	15	12	4	1	15	16	16	4	1	69	68	-30	4	14	18	17
8	4	2	47	52	12	4	2	22	23	-18	4	18	18	21	-30	4	10	29	27

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ACETYLCHAPLATRIN 1(C)

PAGE 8

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-30	4	9	32	32	-3	5	7	49	43	5	5	11	17	15	-11	5	13	15	16
-30	4	8	49	48	-3	5	6	56	57	-7	5	12	22	23	-11	5	12	23	15
-32	4	18	16	11	-3	5	5	95	84	-7	5	10	19	18	-11	5	11	36	38
-32	4	13	22	21	-3	5	4	58	54	-7	5	9	40	41	-11	5	10	19	20
-32	4	11	17	17	-3	5	3	107	105	-7	5	8	30	31	-11	5	8	35	35
-32	4	10	15	13	-3	5	2	75	64	-7	5	7	62	59	-11	5	7	69	68
-32	4	9	21	20	-3	5	1	91	80	-7	5	6	28	23	-11	5	6	71	60
-32	4	6	18	16	3	5	0	124	114	-7	5	5	71	70	-11	5	5	85	74
-32	4	4	24	23	3	5	1	69	57	-7	5	4	24	21	-11	5	4	62	60
-34	4	17	21	20	3	5	2	44	39	-7	5	3	51	50	-11	5	3	23	23
-34	4	14	16	13	3	5	3	76	65	-7	5	2	27	23	-11	5	2	38	39
-34	4	11	19	20	3	5	4	23	22	-7	5	1	79	75	-11	5	1	38	35
-34	4	10	24	23	3	5	5	13	11	-7	5	0	44	46	-11	5	0	15	17
-38	4	13	18	19	3	5	6	19	23	7	5	1	109	97	11	5	1	42	37
-38	4	12	18	17	3	5	7	27	26	7	5	4	30	30	11	5	2	38	36
-38	4	10	21	19	3	5	8	23	25	7	5	5	48	53	11	5	3	31	33
-1	5	13	18	16	3	5	9	24	27	7	5	6	19	22	11	5	4	28	27
-1	5	9	36	36	-5	5	11	30	33	7	5	7	20	21	11	5	6	17	15
-1	5	8	28	28	-5	5	9	16	17	-9	5	14	18	21	-13	5	15	22	20
-1	5	7	29	29	-5	5	8	37	37	-9	5	13	17	18	-13	5	12	32	32
-1	5	5	77	66	-5	5	7	79	77	-9	5	12	28	23	-13	5	11	31	29
-1	5	4	77	74	-5	5	6	58	49	-9	5	10	15	12	-13	5	10	27	25
-1	5	3	32	36	-5	5	5	73	71	-9	5	9	27	25	-13	5	9	52	54
-1	5	2	62	45	-5	5	4	92	97	-9	5	8	20	19	-13	5	8	42	43
-1	5	1	63	66	-5	5	3	45	37	-9	5	7	47	47	-13	5	7	87	81
1	5	0	43	34	-5	5	2	92	86	-9	5	6	31	24	-13	5	6	41	39
1	5	1	153	149	-5	5	1	88	83	-9	5	5	89	84	-13	5	5	56	48
1	5	2	40	38	5	5	0	17	17	-9	5	4	43	36	-13	5	4	68	64
1	5	3	88	86	5	5	1	76	65	-9	5	3	83	79	-13	5	3	63	59
1	5	4	30	20	5	5	2	84	79	-9	5	2	39	32	-13	5	2	19	19
1	5	5	15	15	5	5	3	19	18	-9	5	1	47	42	13	5	0	59	58
1	5	6	22	23	5	5	4	12	11	9	5	0	53	54	13	5	1	43	44
1	5	8	35	31	5	5	5	74	72	9	5	1	16	17	13	5	2	33	34
-3	5	11	21	21	5	5	6	26	25	9	5	3	15	15	13	5	3	56	57
-3	5	9	36	32	5	5	7	31	29	9	5	5	15	15	13	5	4	16	15
-3	5	8	23	24	5	5	8	24	25	9	5	7	17	17	13	5	5	31	31

ACETYLCHAPTATIN 1(CC)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

PAGE 5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-19	5	14	21	21	-23	5	7	17	18	-29	5	3	23	22	-29	5	3	23	43
-19	5	13	35	35	-23	5	6	46	49	-31	5	15	17	17	-31	5	15	17	25
-19	5	12	21	22	-23	5	5	17	20	-31	5	11	19	19	-31	5	11	19	27
-19	5	11	29	30	-23	5	4	16	18	-31	5	10	16	14	-31	5	10	16	25
-19	5	9	24	26	-23	5	3	48	50	-31	5	9	24	21	-31	5	9	24	16
-19	5	8	48	53	-25	5	16	26	28	-31	5	8	18	15	-31	5	8	18	46
-19	5	7	29	28	-25	5	15	17	20	-33	5	16	24	24	-33	5	16	24	35
-19	5	6	47	41	-25	5	14	19	19	-33	5	13	17	19	-33	5	13	17	32
-19	5	5	26	25	-25	5	13	54	54	-33	5	12	17	15	-33	5	12	17	107
-19	5	4	18	19	-25	5	11	57	60	-33	5	9	17	17	-33	5	9	17	14
-19	5	2	18	17	-25	5	10	18	21	-35	5	15	17	16	-35	5	15	17	139
19	5	0	21	23	-25	5	9	26	29	-35	5	11	19	16	-35	5	11	19	12
19	5	1	24	20	-25	5	8	27	31	-35	5	8	16	16	-35	5	8	16	108
19	5	3	16	17	-25	5	7	39	38	-35	5	7	16	19	-35	5	7	16	33
-21	5	16	27	29	-25	5	6	20	21	-37	5	10	18	14	-37	5	10	18	40
-21	5	15	35	33	-25	5	5	32	35	0	6	0	20	19	0	6	0	20	56
-21	5	14	34	34	-25	5	4	42	41	0	6	1	61	45	0	6	1	61	37
-21	5	13	40	44	-25	5	3	27	25	0	6	2	40	29	0	6	2	40	84
-21	5	11	15	16	-27	5	15	19	19	0	6	3	26	27	0	6	3	26	31
-21	5	10	29	25	-27	5	13	42	45	0	6	4	35	35	0	6	4	35	42
-21	5	9	37	35	-27	5	12	15	14	0	6	5	58	62	0	6	5	58	21
-21	5	8	27	26	-27	5	11	19	17	0	6	7	33	36	0	6	7	33	17
-21	5	7	37	39	-27	5	10	16	14	0	6	9	20	14	0	6	9	20	23
-21	5	6	26	23	-27	5	9	34	37	-2	6	13	16	19	-2	6	13	16	28
-21	5	5	20	22	-27	5	8	23	23	-2	6	9	16	18	-2	6	9	16	41
-21	5	4	14	17	-27	5	7	33	34	-2	6	7	21	24	-2	6	7	21	118
-21	5	3	21	22	-27	5	5	29	29	-2	6	5	58	51	-2	6	5	58	11
-21	5	1	31	32	-27	5	4	35	36	-2	6	4	11	11	-2	6	4	11	124
-23	5	16	20	22	-27	5	3	22	23	-2	6	3	101	95	-2	6	3	101	63
-23	5	15	41	39	-29	5	19	16	13	-2	6	2	26	25	-2	6	2	26	18
-23	5	14	21	21	-29	5	13	31	29	-2	6	1	232	218	-2	6	1	232	30
-23	5	13	65	69	-29	5	12	16	20	2	6	0	11	10	2	6	0	11	13
-23	5	11	15	16	-29	5	11	22	22	2	6	1	42	54	2	6	1	42	47
-23	5	10	47	44	-29	5	9	22	24	2	6	2	11	12	2	6	2	11	26
-23	5	9	30	28	-29	5	7	26	27	2	6	3	87	86	2	6	3	87	23
-23	5	8	32	35	-29	5	6	17	18	2	6	4	24	19	-8	6	4	24	41

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-12	6	12	20	24	-16	6	8	17	15	-22	6	8	16	15	-30	6	9	23	26
-12	6	11	43	44	-16	6	7	52	49	-22	6	7	25	28	-30	6	8	16	17
-12	6	10	18	20	-16	6	6	26	26	-22	6	6	19	21	-32	6	13	21	22
-12	6	9	70	74	-16	6	5	73	68	-22	6	5	30	31	-32	6	12	16	15
-12	6	8	30	32	-16	6	4	16	14	-22	6	3	19	15	-32	6	7	22	21
-12	6	7	92	84	-16	6	3	38	32	-22	6	1	36	34	-32	6	5	18	16
-12	6	6	13	12	-16	6	1	23	20	-24	6	19	17	18	-34	6	18	17	15
-12	6	5	46	45	-16	6	1	33	37	-24	6	18	17	17	-34	6	7	24	24
-12	6	3	39	30	-16	6	2	16	15	-24	6	15	18	18	-34	6	5	18	11
-12	6	1	72	74	-18	6	17	23	23	-24	6	14	16	14	-36	6	13	18	16
12	6	1	25	24	-18	6	16	18	18	-24	6	13	15	12	-1	7	10	21	24
12	6	2	18	21	-18	6	12	25	26	-24	6	12	23	28	-1	7	8	38	47
12	6	3	45	49	-18	6	11	82	83	-24	6	11	23	24	-1	7	7	15	14
12	6	5	26	24	-18	6	10	22	23	-24	6	10	14	11	-1	7	6	22	23
-14	6	15	32	32	-18	6	9	47	46	-24	6	7	25	29	-1	7	5	29	24
-14	6	13	24	27	-18	6	8	20	16	-24	6	3	36	40	-1	7	4	49	58
-14	6	12	17	17	-18	6	7	44	44	-24	6	1	16	16	-1	7	3	31	26
-14	6	11	14	14	-18	6	6	13	14	-26	6	17	22	17	-1	7	2	103	84
-14	6	10	26	27	-18	6	3	27	26	-26	6	15	17	19	-1	7	1	69	66
-14	6	9	49	49	-18	6	0	16	19	-26	6	13	20	17	1	7	0	77	63
-14	6	8	24	29	-20	6	15	21	18	-26	6	11	50	48	1	7	1	89	81
-14	6	7	47	52	-20	6	14	33	34	-26	6	7	20	23	1	7	2	41	37
-14	6	6	11	9	-20	6	13	47	47	-26	6	5	23	21	1	7	4	26	30
-14	6	5	13	12	-20	6	12	22	23	-26	6	4	15	13	1	7	6	21	23
-14	6	3	55	51	-20	6	11	21	26	-26	6	3	24	18	1	7	8	26	28
-14	6	1	67	68	-20	6	6	13	15	-26	6	1	16	17	1	7	9	23	27
14	6	0	14	11	-20	6	5	32	36	-28	6	15	18	19	1	7	10	16	15
14	6	1	25	27	-20	6	3	19	18	-28	6	14	15	16	-3	7	11	33	36
14	6	3	61	62	-20	6	1	30	29	-28	6	13	23	24	-3	7	10	16	19
-16	6	17	20	24	-22	6	17	17	14	-28	6	10	17	17	-3	7	9	25	24
-16	6	14	17	13	-22	6	14	16	17	-28	6	9	39	38	-3	7	8	22	24
-16	6	13	26	25	-22	6	13	38	40	-28	6	7	20	19	-3	7	7	18	20
-16	6	12	18	15	-22	6	12	31	31	-28	6	5	25	25	-3	7	6	44	45
-16	6	11	48	51	-22	6	11	56	56	-30	6	16	24	23	-3	7	5	36	31
-16	6	10	37	38	-22	6	10	25	24	-30	6	11	16	11	-3	7	4	48	48
-16	6	9	68	65	-22	6	9	31	33	-30	6	10	19	24	-3	7	3	72	64

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	7	7	26	23	-11	7	8	33	34	-15	7	5	24	26	-19	7	2	33	33	-27	7	14	20	22
-7	7	6	82	78	-11	7	7	39	41	-15	7	4	51	45	-19	7	1	26	27	-27	7	13	28	27
-7	7	5	44	43	-11	7	6	48	48	-15	7	3	18	21	19	7	0	30	29	-27	7	12	22	25
-7	7	4	86	72	-11	7	5	35	36	-15	7	2	21	24	-21	7	19	20	13	-27	7	10	30	32
-7	7	3	56	52	-11	7	3	12	13	-15	7	1	39	39	-21	7	16	28	28	-27	7	9	25	25
-7	7	2	42	40	-11	7	2	51	39	15	7	0	35	37	-21	7	15	16	15	-27	7	7	18	20
-7	7	1	33	35	11	7	0	48	49	15	7	1	36	37	-21	7	14	24	25	-27	7	6	20	19
7	7	0	57	63	11	7	1	25	23	15	7	4	27	28	-21	7	12	27	27	-29	7	16	22	19
7	7	1	26	28	11	7	2	37	36	-17	7	16	22	23	-21	7	11	21	22	-29	7	14	21	22
7	7	2	31	33	11	7	3	14	12	-17	7	15	17	20	-21	7	9	23	24	-29	7	13	23	22
7	7	3	26	26	11	7	4	52	55	-17	7	14	22	22	-21	7	7	22	24	-29	7	12	21	24
7	7	4	43	45	11	7	6	16	18	-17	7	13	16	19	-21	7	6	28	26	-29	7	9	21	29
7	7	5	31	32	-13	7	15	17	18	-17	7	12	36	36	-21	7	5	17	19	-29	7	7	20	21
7	7	6	28	31	-13	7	11	27	27	-17	7	11	16	14	-21	7	4	18	18	-29	7	6	19	21
7	7	7	21	17	-13	7	10	48	43	-17	7	10	24	24	-23	7	16	22	17	-29	7	4	18	18
-9	7	13	17	17	-13	7	9	34	38	-17	7	9	20	21	-23	7	14	22	21	-31	7	13	22	24
-9	7	11	23	22	-13	7	8	18	21	-17	7	8	33	35	-23	7	13	20	22	-31	7	12	18	17
-9	7	10	16	14	-13	7	7	31	31	-17	7	7	45	44	-23	7	11	19	22	-31	7	11	22	20
-9	7	9	20	18	-13	7	6	56	55	-17	7	6	24	26	-23	7	10	23	22	-31	7	9	26	25
-9	7	8	27	24	-13	7	5	19	21	-17	7	5	21	24	-23	7	9	14	11	-31	7	7	20	17
-9	7	7	38	38	-13	7	4	31	30	-17	7	4	34	34	-23	7	8	17	19	-33	7	13	16	15
-9	7	6	13	10	-13	7	3	30	25	-17	7	3	29	26	-23	7	7	14	16	-33	7	10	16	14
-9	7	5	44	42	-13	7	2	28	32	-17	7	2	19	18	-23	7	6	26	25	-33	7	6	18	14
-9	7	4	46	44	-13	7	1	34	35	-17	7	1	18	18	-23	7	5	25	22	-35	7	6	22	21
-9	7	3	13	11	13	7	0	32	33	17	7	0	79	78	-23	7	3	17	18	0	8	0	62	60
-9	7	2	56	55	13	7	2	18	18	17	7	2	18	21	-25	7	16	15	12	0	8	1	27	18
-9	7	1	12	11	13	7	3	28	28	-19	7	16	26	26	-25	7	15	16	13	0	8	2	133	135
9	7	0	31	30	13	7	5	18	17	-19	7	15	24	26	-25	7	14	17	14	0	8	4	46	47
9	7	1	41	44	-15	7	17	16	13	-19	7	12	30	30	-25	7	13	24	21	0	8	5	20	20
9	7	2	43	44	-15	7	16	23	27	-19	7	11	35	37	-25	7	12	25	26	0	8	8	16	18
9	7	4	35	38	-15	7	13	23	22	-19	7	10	28	29	-25	7	11	17	18	-2	8	11	18	14
9	7	5	21	23	-15	7	12	26	24	-19	7	8	52	51	-25	7	10	31	37	-2	8	10	30	26
-11	7	15	22	20	-15	7	9	45	48	-19	7	7	21	21	-25	7	8	27	30	-2	8	8	41	39
-11	7	11	22	23	-15	7	8	46	47	-19	7	6	23	23	-25	7	6	21	21	-2	8	6	58	68
-11	7	10	35	40	-15	7	7	15	14	-19	7	5	18	17	-25	7	5	29	29	-2	8	4	62	69
-11	7	9	21	21	-15	7	6	64	64	-19	7	4	56	53	-25	7	4	36	39	-2	8	3	37	37

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	8	2	50	43	-8	8	8	21	21	12	8	0	80	78	-18	8	6	43	44
2	8	0	38	32	-8	8	7	23	20	12	8	2	38	42	-18	8	5	30	28
2	8	2	44	39	-8	8	5	12	12	12	8	4	28	28	-18	8	4	44	44
2	8	4	41	40	-8	8	4	63	62	12	8	6	17	17	-18	8	2	33	36
2	8	6	34	30	-8	8	3	13	10	-14	8	14	25	25	18	8	0	23	21
2	8	8	46	43	-8	8	2	66	67	-14	8	13	18	20	-20	8	13	18	20
-4	8	12	20	19	-8	8	1	22	20	-14	8	12	20	16	-20	8	12	30	31
-4	8	6	21	21	8	8	0	20	17	-14	8	10	41	37	-20	8	10	17	23
-4	8	5	29	29	8	8	1	14	14	-14	8	8	62	64	-20	8	9	27	26
-4	8	4	48	54	8	8	2	91	91	-14	8	7	24	22	-20	8	8	41	40
-4	8	3	12	10	8	8	4	60	62	-14	8	6	31	30	-20	8	6	40	39
-4	8	2	17	17	8	8	6	22	20	-14	8	4	45	42	-20	8	4	39	41
-4	8	1	13	13	8	8	8	24	22	-14	8	3	24	24	-20	8	0	18	18
4	8	0	21	20	-10	8	13	17	15	14	8	0	32	31	20	8	1	18	10
4	8	2	41	36	-10	8	12	22	22	14	8	1	26	29	-22	8	12	36	36
4	8	5	15	13	-10	8	10	35	30	14	8	2	31	29	-22	8	10	15	14
4	8	7	19	18	-10	8	9	17	19	14	8	4	19	15	-22	8	9	15	14
4	8	8	20	21	-10	8	8	46	39	14	8	6	16	19	-22	8	8	21	24
4	8	10	19	17	-10	8	7	22	21	-16	8	12	49	47	-22	8	6	45	47
-6	8	12	39	33	-10	8	6	29	31	-16	8	11	20	22	-22	8	4	17	21
-6	8	11	17	15	-10	8	4	36	31	-16	8	10	37	34	-22	8	2	20	22
-6	8	10	22	23	-10	8	3	21	18	-16	8	9	14	18	-22	8	0	27	25
-6	8	8	19	20	-10	8	2	119	122	-16	8	8	14	12	-24	8	14	23	22
-6	8	7	15	13	10	8	0	26	31	-16	8	7	32	32	-24	8	12	35	38
-6	8	6	34	36	10	8	1	23	24	-16	8	6	39	43	-24	8	11	15	15
-6	8	4	73	64	10	8	2	26	27	-16	8	4	17	19	-24	8	10	22	22
-6	8	2	31	37	10	8	4	33	34	-16	8	3	17	18	-24	8	8	26	26
-6	8	1	32	35	-12	8	10	56	62	-16	8	2	31	32	-24	8	6	20	19
6	8	0	80	87	-12	8	9	35	31	16	8	0	71	71	-24	8	4	33	33
6	8	1	20	19	-12	8	8	52	54	16	8	2	16	15	-24	8	3	21	21
6	8	2	21	19	-12	8	7	16	19	16	8	6	19	20	24	8	2	17	13
6	8	3	18	19	-12	8	6	38	38	-18	8	15	28	31	-26	8	10	33	36
6	8	4	32	28	-12	8	5	13	13	-18	8	14	33	33	-26	8	9	19	21
6	8	5	26	25	-12	8	3	23	22	-18	8	13	19	21	-26	8	6	41	43
6	8	6	43	38	-12	8	2	38	40	-18	8	8	26	25	-26	8	5	21	19
-8	8	12	20	18	-12	8	1	17	22	-18	8	7	14	12	-26	8	2	16	15

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-3	9	6	41	43	-7	9	3	15	15	-13	9	9	23	25	-2	10	6	23	25
-3	9	5	41	40	-7	9	1	81	80	-13	9	8	17	16	-2	10	5	26	26
-3	9	4	21	19	7	9	0	21	20	-13	9	5	47	46	-2	10	3	14	11
-3	9	3	36	36	7	9	1	63	71	-13	9	4	26	29	-2	10	2	17	13
-3	9	2	18	18	7	9	2	29	29	-13	9	3	33	34	-2	10	1	23	27
-3	9	1	38	34	7	9	3	15	13	-13	9	2	18	17	2	10	1	31	27
3	9	0	23	24	7	9	5	33	32	-13	9	1	55	59	2	10	2	16	15
3	9	1	34	35	7	9	8	17	15	13	9	0	27	29	2	10	3	16	15
3	9	2	44	44	-9	9	11	19	17	13	9	1	26	26	-2	10	5	22	25
3	9	3	22	23	-9	9	10	27	24	13	9	2	16	16	-4	10	9	19	22
3	9	4	39	44	-9	9	9	26	23	-15	9	12	21	18	-4	10	8	22	23
3	9	5	30	31	-9	9	8	16	17	-15	9	11	18	20	-4	10	7	20	19
3	9	7	18	19	-9	9	6	48	45	-15	9	10	24	23	-4	10	6	24	21
3	9	8	16	15	-9	9	3	34	32	-15	9	9	18	20	-4	10	5	22	20
-5	9	13	18	11	-9	9	2	21	22	-15	9	8	18	15	-4	10	4	32	33
-5	9	11	20	23	-9	9	1	33	32	-15	9	7	36	39	-4	10	3	22	26
-5	9	9	31	32	-9	9	0	58	59	-15	9	5	42	46	-4	10	2	31	36
-5	9	8	30	29	9	9	1	21	20	-15	9	4	29	26	4	10	0	20	19
-5	9	7	34	32	9	9	2	22	23	-15	9	3	57	62	4	10	1	16	14
-5	9	6	30	36	9	9	4	23	22	-15	9	2	35	35	4	10	3	17	17
-5	9	5	28	33	9	9	7	17	19	-15	9	1	37	36	4	10	4	22	21
-5	9	4	29	23	-11	9	10	33	37	-17	9	11	29	29	-6	10	5	27	30
-5	9	3	28	28	-11	9	9	28	28	-17	9	10	16	18	-6	10	7	25	26
-5	9	2	20	21	-11	9	8	24	20	-17	9	9	21	19	-6	10	5	19	18
-5	9	1	48	51	-11	9	7	24	23	-17	9	8	38	41	-6	10	4	16	18
5	9	0	42	41	-11	9	6	30	33	-17	9	7	30	31	-6	10	3	23	22
5	9	1	38	38	-11	9	4	17	17	-17	9	6	44	43	-6	10	2	24	23
5	9	2	32	35	-11	9	3	31	33	-17	9	5	34	35	-6	10	1	27	29
5	9	3	36	36	-11	9	2	14	15	-17	9	4	30	33	-6	10	0	29	24
5	9	7	27	25	-11	9	1	38	41	-17	9	3	20	20	6	10	1	39	37
5	9	9	16	20	11	9	0	24	26	-17	9	2	15	15	6	10	0	30	36
-7	9	10	21	22	11	9	1	30	31	-17	9	1	17	17	6	10	1	47	51
-7	9	9	20	22	11	9	2	19	18	-19	9	12	23	21	6	10	3	47	51
-7	9	7	32	33	11	9	3	16	19	-19	9	9	30	31	6	10	5	22	20
-7	9	5	49	46	-13	9	11	23	24	-19	9	8	24	28	-8	10	9	19	18
-7	9	4	19	19	-13	9	10	33	38	-19	9	7	15	16	-8	10	5	40	46

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-8	10	3	46	48	-14	13	6	32	33	-28	10	13	16	20	-7	11	8	27	28
-8	10	2	23	24	-14	10	5	30	33	-1	11	12	19	17	-7	11	7	17	17
-8	10	1	15	13	-14	10	4	20	21	-1	11	6	22	22	-7	11	6	23	22
8	10	1	47	48	-14	10	3	35	41	-1	11	5	22	20	-7	11	5	23	27
8	10	3	30	32	-14	10	2	16	18	-1	11	4	62	59	-7	11	4	16	12
-10	10	11	23	21	-14	10	1	24	22	-1	11	3	17	18	-7	11	2	34	35
-10	10	10	15	16	14	10	1	33	34	-1	11	2	26	27	-7	11	1	23	25
-10	10	9	47	47	-16	10	11	24	22	1	11	0	49	48	7	11	0	42	44
-10	10	7	17	18	-16	10	9	25	27	1	11	2	40	39	7	11	1	41	38
-10	10	6	27	27	-16	10	5	18	17	1	11	3	33	34	7	11	2	46	47
-10	10	5	21	27	-16	10	3	16	13	1	11	4	20	20	7	11	4	18	18
-10	10	3	34	37	16	10	5	21	21	1	11	5	27	30	-9	11	8	26	28
-10	10	2	17	17	-18	10	11	28	30	1	11	6	17	20	-9	11	7	19	18
-10	10	1	35	36	-18	10	9	18	17	1	11	7	16	20	-9	11	6	51	56
10	10	0	16	17	-18	10	7	38	39	1	11	8	16	10	-9	11	4	23	21
10	10	1	21	24	-18	10	5	21	21	-3	11	8	17	18	-9	11	3	25	27
10	10	2	22	18	-18	10	3	16	15	-3	11	6	45	47	-9	11	2	63	60
10	10	3	25	26	-18	10	1	18	20	-3	11	5	19	18	-9	11	1	28	29
-12	10	11	21	22	-20	10	12	17	17	-3	11	4	15	17	9	11	0	47	49
-12	10	9	28	28	-20	10	10	22	25	-3	11	2	32	35	9	11	3	16	12
-12	10	7	38	37	-20	10	9	35	36	-3	11	1	21	23	9	11	5	17	14
-12	10	6	21	21	-20	10	8	20	17	3	11	1	21	24	-11	11	10	32	34
-12	10	5	42	41	-20	10	7	21	19	3	11	2	48	48	-11	11	8	35	36
-12	10	4	26	30	-20	10	5	30	31	3	11	3	29	26	-11	11	7	18	15
-12	10	3	38	42	-20	10	4	25	25	3	11	4	52	49	-11	11	6	22	20
-12	10	2	14	14	-22	10	12	20	16	3	11	10	17	11	-11	11	5	21	18
-12	10	1	20	20	-22	10	11	44	45	-5	11	8	26	31	-11	11	4	50	52
12	10	0	15	14	-22	10	10	25	28	-5	11	7	24	20	-11	11	3	26	32
12	10	1	35	36	-22	10	8	16	14	-5	11	6	16	17	-11	11	2	26	27
12	10	2	19	19	-22	10	6	18	16	-5	11	5	16	14	-11	11	1	33	29
12	10	3	30	28	-22	10	5	27	26	-5	11	4	48	49	11	11	2	17	18
12	10	7	20	17	-22	10	3	17	19	-5	11	2	45	41	11	11	14	17	12
-14	10	11	21	22	-24	10	7	26	28	5	11	1	34	34	-13	11	11	16	16
-14	10	10	15	14	-26	10	9	17	13	5	11	2	57	54	-13	11	10	47	48
-14	10	9	18	22	-26	10	7	23	21	5	11	3	26	26	-13	11	8	19	21
-14	10	7	56	56	-26	10	1	18	21	5	11	6	28	29	-13	11	11	16	18
-14	10	7	19	19	-26	10	1	17	16	-13	11	8	17	16	-13	11	11	19	20

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR ACETYLCHAPLATRIN 1(C)

PAGE 15

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-23	11	10	20	22	-8	12	9	18	18	-18	12	10	22	23	5	13	1	34	33
-23	11	8	19	16	-8	12	8	20	20	-18	12	9	16	14	5	13	3	20	18
-25	11	12	17	15	-8	12	7	20	17	-18	12	8	32	34	-7	13	3	31	30
-27	11	12	25	24	-8	12	6	34	35	-20	12	10	29	31	-7	13	2	16	19
-27	11	8	16	17	-8	12	2	35	37	-20	12	9	20	16	-7	13	1	18	18
-29	11	10	18	16	8	12	0	28	30	-20	12	6	17	20	7	13	1	19	19
0	12	0	64	58	8	12	1	15	14	-20	12	4	22	19	7	13	3	16	15
0	12	2	30	31	8	12	4	16	13	-22	12	13	19	13	7	13	5	25	20
0	12	4	39	38	-10	12	10	35	35	-22	12	12	18	18	-9	13	5	24	24
0	12	7	16	13	-10	12	8	32	30	-26	12	9	17	13	-9	13	3	28	28
-2	12	8	20	22	-10	12	5	20	21	-28	12	14	18	12	-9	13	1	17	16
-2	12	6	39	42	-10	12	4	51	51	-28	12	12	17	16	9	13	1	17	16
-2	12	2	27	30	-10	12	2	33	34	-30	12	14	19	16	-11	13	13	18	22
-2	12	1	30	26	10	12	0	22	22	-32	12	15	16	5	-11	13	7	21	21
2	12	0	20	24	10	12	1	17	12	-1	13	7	21	22	-11	13	6	19	21
2	12	1	17	18	10	12	4	19	19	-1	13	1	29	27	-11	13	5	36	37
2	12	2	58	59	-12	12	8	28	28	1	13	1	30	32	-13	13	13	18	18
2	12	6	16	16	-12	12	6	21	20	1	13	3	24	22	-13	13	8	18	13
-4	12	7	19	20	-12	12	5	26	25	1	13	5	18	17	-13	13	7	39	40
-4	12	4	29	28	-12	12	2	22	22	-3	13	9	16	13	-13	13	4	15	11
-4	12	2	44	42	-14	12	12	27	24	-3	13	7	21	20	-13	13	1	23	23
-4	12	1	23	23	-14	12	11	16	14	-3	13	5	18	20	-15	13	9	18	16
4	12	0	63	66	-14	12	10	31	31	-3	13	3	39	40	-15	13	8	16	12
4	12	2	30	29	-14	12	8	36	36	-3	13	2	17	12	-15	13	6	17	12
-6	12	8	34	37	-14	12	6	45	49	-3	13	1	27	28	-15	13	5	20	19
-6	12	7	17	17	-16	12	14	17	12	3	13	1	26	29	-15	13	3	35	36
-6	12	6	50	47	-16	12	12	20	16	3	13	3	16	13	-15	13	1	20	17
-6	12	3	23	23	-16	12	6	22	19	3	13	5	20	20	-17	13	7	27	28
-6	12	2	38	43	-16	12	4	20	23	-5	13	4	18	13	-17	13	5	20	18
-6	12	0	40	43	-16	12	2	29	32	-5	13	2	16	13	-17	13	3	18	17
6	12	2	38	41	16	12	2	18	15	-5	13	1	16	17	-19	13	14	17	9
6	12	4	19	22	-18	12	12	19	18	5	13	0	15	18	-19	13	11	18	20
6	12	6	24	21															

END OF LISTING OF FILE :GACA17-PRINT(1,*,1) FOR USER GACA17 AT 1979/11/30__02:29:10
55

Crystal data

Glaucolide-F, $C_{24}H_{30}O_{10}$, $M_r=477.9$, orthorhombic, $a=8.481(1)$,
 $b=14.448(2)$, $c=19.580(2)$ Å, $U=2399.2$ Å³, $D_m=1.31$, $D_c=1.32$ Mg m⁻³,
 $Z=4$, $F(000)=1016$, space group $P2_12_12_1$, $\mu(\text{Mo-K}\alpha)=1.11$ cm⁻¹

0,14,L

3	112	114	0
1	64	75	0

0,13,L

7	156	117	750
5	106	117	750

0,12,L

6	140	179	0
5	103	97	0
0	88	118	0

0,11,L

9	97	97	750
8	170	199	750
1	185	196	250

0,10,L

15	94	125	500
11	54	52	0
10	182	196	500
9	132	150	0
7	119	143	0
6	124	124	500
5	211	242	500
2	63	46	500
1	176	161	0
0	178	159	0

0,9,L

17	134	112	750
13	100	82	250
12	142	137	250
11	105	102	750
10	137	130	750
6	60	43	750
4	125	113	750
3	180	189	750
2	67	33	750

0,8,L

18	43	23	0
----	----	----	---

17	91	88	500
13	94	94	0
11	173	178	0
10	181	136	0
9	170	213	0
8	110	86	0
7	115	124	500
6	202	185	500
5	90	94	500
3	122	89	0
2	241	198	0
1	300	288	0
0	433	404	0

0,7,L

13	122	125	250
12	74	66	750
10	112	73	250
9	168	192	750
8	96	122	750
7	168	190	250
5	38	68	250
4	132	120	750
3	427	378	250
2	404	346	250
1	443	456	750

0,6,L

14	149	137	500
12	143	155	500
9	180	194	500
8	185	191	0
5	203	221	500
4	258	253	500
2	78	73	0
1	283	352	500
0	651	612	0

0,5,L

20	119	135	250
17	79	68	750
12	138	110	250
11	122	138	750
10	121	106	750
9	401	411	750
8	591	606	750

0,5,L

7	68	80	250
6	219	202	750
4	260	258	250
2	680	732	250
1	264	261	750

0,4,L

19	116	127	0
12	151	136	500
10	142	116	0
9	306	316	0
8	332	326	0
7	391	363	0
6	339	351	0
5	311	216	0
4	472	458	0
3	266	222	500
2	276	250	500
1	625	681	0
0	539	540	0

0,3,L

18	160	171	250
14	52	86	250
13	234	220	250
11	81	83	750
10	258	289	250
9	86	101	750
8	517	568	750
6	101	90	750
5	213	154	750
4	404	406	750
3	402	347	250
2	751	951	250
1	125	32	750

0,2,L

19	179	171	0
18	87	117	0
15	177	173	500
13	224	205	500
12	129	106	500
11	328	306	0
10	301	272	0
9	144	151	0

8	83	74	500
7	215	239	500
6	138	163	500
4	624	675	500
3	450	414	0
2	103	196	500
1	245	365	0
0	1002	1055	0

0,1,L

21	52	41	750
20	115	100	250
15	104	95	250
14	86	92	750
12	265	304	250
11	54	8	250
10	456	495	250
9	127	129	750
8	573	607	750
7	463	473	750
6	99	63	750
5	746	750	750
4	247	318	250
3	369	582	750
2	109	245	750
1	319	373	750

0,0,L

16	104	90	500
14	128	52	0
12	223	246	500
10	605	568	0
8	825	789	0
6	196	176	500
4	1271	1279	500
2	409	342	0

-1,16,L

0	94	67	250
---	----	----	-----

-1,14,L

4	86	105	226
---	----	-----	-----

-1,13,L

2 63 65 908

-1,12,L

8 113 126 895
7 153 140 47
5 99 104 64
3 113 117 224

-1,11,L

14 85 78 892
13 73 85 975
10 82 98 847
8 97 115 786
7 128 151 753
4 102 141 797
3 105 53 204
2 152 160 38

-1,10,L

12 139 127 881
9 109 136 998
8 217 191 900
4 139 111 112
2 61 65 849
1 130 122 0
0 181 179 250

-1,9,L

14 129 99 783
12 96 94 982
9 181 214 247
6 177 168 168
5 112 93 805
4 84 83 801
1 225 247 169
0 219 216 750

-1,8,L

15 110 119 20
14 117 108 986
13 134 132 864
11 101 115 76
10 153 164 183

9 193 200 753
6 58 73 57
5 125 171 776
4 76 85 58
3 110 124 168
2 286 282 990
1 189 188 72
0 100 153 250

-1,7,L

17 102 88 232
14 106 48 70
13 149 133 130
12 66 62 810
11 85 105 843
10 221 239 184
9 89 78 77
8 156 146 958
6 235 241 35
5 92 100 941
4 207 209 910
3 80 60 768
2 456 435 103
1 220 212 809
0 323 305 750

-1,6,L

20 68 69 949
16 109 119 140
15 108 105 911
13 72 84 69
12 149 179 91
11 146 132 781
10 157 183 178
9 148 168 884
8 279 251 25
7 251 248 878
6 218 178 102
5 118 114 895
3 239 254 204
2 517 437 964
1 402 358 21
0 324 337 250

-1,5,L

17 74 97 149

-1,5,L

12	182	181	948
10	164	147	50
9	159	141	66
8	168	162	224
7	223	208	792
6	213	221	947
5	72	51	30
4	562	526	188
3	148	89	976
2	400	419	907
1	127	130	29
0	291	283	750

-4,5,L

12	89	76	189
10	218	205	957
9	100	87	32
8	114	119	45
7	94	87	908
6	239	245	202
5	78	33	889
4	174	154	956
3	301	266	67
2	276	291	192
1	185	157	71
0	379	388	0

-1,4,L

19	120	126	90
14	83	80	966
12	163	203	780
11	194	245	86
10	125	171	896
9	107	102	760
8	252	241	790
7	429	396	156
6	271	251	196
5	397	420	860
4	225	239	897
3	490	454	754
2	239	221	995
1	428	421	886
0	917	883	250

-4,4,L

17	55	43	850
15	136	129	45

-1,1,L

10	249	223	202
9	111	134	151
8	332	340	7
7	318	295	58
6	527	574	805
5	881	895	8
4	526	569	208
3	971	1028	913
2	355	316	172
1	143	200	216
0	1716	1922	750

-1,3,L

19	137	111	797
17	78	88	828
16	70	54	87
15	142	166	230
13	114	106	810
12	129	151	151
11	124	142	803

-1,0,L

18	96	93	0
15	182	187	750
14	95	110	500
12	123	166	0
11	221	191	750
10	111	121	0
9	196	200	250
8	222	165	500
7	230	211	250
6	1001	904	500
5	387	314	750
4	60	11	0
3	68	98	750

-4,6,L

5	204	209	997
3	142	129	957
2	78	95	793
0	105	130	500

-1,0,L

2	712	800	500
1	203	155	750

-2,15,L

8	51	34	37
0	111	113	0

-2,14,L

3	56	52	985
0	113	110	500

-2,13,L

2	107	70	212
0	88	87	0

-2,12,L

8	119	109	66
5	136	150	6
1	69	66	79

-2,11,L

11	92	89	113
9	115	105	899
7	127	96	850
6	83	84	86
5	107	119	799
4	78	93	176
0	116	92	500

-2,10,L

9	94	91	870
8	106	101	950
7	150	132	214
5	61	76	764
4	239	286	50
3	119	135	78
2	157	157	95
1	113	78	248
0	130	113	500

-2,9,L

14	78	69	764
12	131	147	167
9	122	99	977
8	124	133	117
7	87	120	942
6	141	154	139
5	114	123	239
4	69	50	885
2	128	109	822
-1	135	171	165
0	225	225	0

-2,8,L

17	116	83	925
13	175	165	205
12	90	92	100
10	83	97	55
9	93	112	959
8	163	189	140
7	177	186	920
5	157	158	236
2	92	115	998
1	107	90	806
3	172	174	71
4	75	69	815

-2,7,L

15	115	118	983
14	134	163	755

-1,3,L

10	130	135	859
9	170	139	105
8	310	285	970
7	204	181	905
6	60	78	998
5	279	290	135
4	424	399	933
3	390	362	85
2	434	480	202
1	1335	1318	958
0	148	204	750

-1,2,L

21	70	63	833
----	----	----	-----

-1,2,L

18	102	121	114
16	139	123	775
15	84	73	226
14	105	113	896
12	122	121	164
11	140	155	911
10	336	299	69
9	281	290	802
8	373	362	0
7	559	561	907
6	227	157	55
5	458	484	226
4	294	305	43
3	781	781	4
2	936	817	943
1	202	228	894
0	828	860	750

-1,1,L

18	49	75	227
16	94	107	989
15	137	138	903
14	106	101	949
13	198	225	921
12	143	155	873
11	168	126	766

-2,7,L

13	125	121	247
12	194	168	235
11	131	115	765
9	139	128	941
8	192	174	766
7	115	121	759
6	202	195	879
5	173	183	27
4	50	46	897
3	80	134	227
1	251	240	50
0	130	157	500

-2,6,L

12	45	56	828
10	110	147	852
9	132	107	888

8	91	84	40
7	367	386	180
6	333	310	214
5	186	178	222
4	280	308	14
3	140	128	993
2	228	221	201
1	427	378	860
0	285	332	0

-2,5,L

17	99	105	147
16	190	183	789
15	193	186	138
14	96	87	861
13	167	204	116
12	187	208	218
11	94	131	944
10	256	237	241
9	129	159	50
8	219	263	783
7	239	233	17
6	358	312	7
5	223	254	231
4	153	166	921
3	77	127	79
2	308	273	205
1	363	363	959
0	461	459	0

-2,4,L

17	55	65	838
16	178	181	953
15	62	93	50
12	118	124	229
11	129	146	822
10	68	44	117
9	259	280	189
8	122	112	806
7	66	24	961
6	333	314	936
5	551	516	961
4	528	539	852
3	203	210	95
2	133	125	928
1	239	262	781
0	228	191	0

-2,3,L

17	105	106	850
15	104	83	71
14	138	137	160
13	87	88	999
12	110	135	794
10	288	291	866
9	219	193	200
8	153	158	1000
7	534	532	754
6	469	464	910
5	266	246	990
4	278	256	853
3	574	587	927
2	373	325	189
1	571	502	171

-2,2,L

17	102	121	67
16	172	148	52
14	115	111	867
13	214	232	158
11	79	74	69
10	73	81	809
9	40	25	816
8	288	273	184
7	218	218	165
6	402	390	232
5	501	451	821
4	424	495	970
3	350	368	134
1	562	610	39
0	365	430	0

-2,1,L

17	105	103	827
16	115	125	781
15	200	215	41
14	140	140	750
13	149	138	987
11	126	132	763
10	81	93	5
9	114	102	915
8	165	154	976
7	152	159	754
6	246	247	15
5	390	372	851

4	489	452	180
3	806	700	119
2	253	171	851
1	990	882	173
0	74	106	500

-2,0,L

16	32	42	0
14	100	89	500
13	251	279	250
12	109	101	500
11	200	256	250
10	233	227	0
9	210	183	750
8	210	237	0
7	402	418	750
6	671	656	0
5	880	828	250
4	95	136	500
3	1406	1291	250
2	61	106	500
1	130	144	750
0	268	212	0

-3,13,L

0	170	174	250
---	-----	-----	-----

-3,12,L

3	106	98	917
2	112	121	4
1	157	199	945

-3,11,L

9	96	82	912
8	166	146	839
5	150	137	16
3	170	166	882
2	143	142	16
1	141	121	31

-3,10,L

7	96	62	817
6	183	174	879
4	195	226	793

-3,4,L

2	692	697	115
1	212	204	202
0	467	510	250

-3,3,L

20	75	50	182
16	189	172	817
13	154	174	973
12	98	75	943
10	147	176	775
9	169	147	836
8	61	81	8
7	205	226	895
6	220	217	66
5	482	492	158
4	241	297	245
3	193	189	884
2	448	367	887
1	236	264	927
0	232	170	750

-3,2,L

16	131	169	203
15	220	226	798
13	74	100	981
12	70	85	114
11	112	124	173
10	130	165	124
9	235	242	998
8	191	204	92
7	168	136	227
6	161	187	127
5	355	322	208
4	452	442	815
3	307	228	101
2	472	521	47
1	184	178	6
0	263	225	250

-3,1,L

17	131	113	947
16	80	73	187
15	118	109	147
13	309	305	949
12	70	49	750

11	126	120	165
10	330	328	218
9	142	131	112
8	284	269	780
7	257	256	950
6	85	41	750
5	207	221	192
4	242	218	72
3	538	593	160
2	136	156	776
1	136	66	896
0	286	208	750

-3,0,L

19	59	83	750
17	98	128	750
16	90	92	500
15	253	280	250
13	120	83	250
12	102	130	500
11	65	90	750
10	60	98	0
9	383	396	750
8	131	107	500
7	174	151	250
5	379	318	250
4	114	113	0
3	666	576	750
2	600	593	0
1	409	389	250

-4,13,L

3	103	79	81
---	-----	----	----

-4,12,L

4	44	41	959
3	140	144	94

4,12,L

2	104	97	929
---	-----	----	-----

-4,12,L

1	124	119	5
---	-----	-----	---

-4,11,L

7	103	79	917
4	172	160	47
1	91	73	226
0	89	70	0

-4,10,L

8	181	176	226
6	138	147	171
3	129	110	168
2	188	200	761
1	358	335	799

-4,9,L

12	84	101	855
11	73	72	976
9	127	121	970
8	149	170	37
6	102	116	877
5	94	75	92
4	132	139	139
3	99	79	195
2	147	153	846
1	76	87	168
0	230	277	0

-4,8,L

12	139	130	865
11	146	127	759
10	163	173	851
7	181	215	243
6	116	131	998
5	168	184	247
4	179	211	203
3	113	115	793
2	226	257	186

-4,7,L

14	72	76	28
13	97	108	798
12	90	67	906
11	71	67	975
7	95	107	788
5	213	203	783
4	156	165	32

3	117	154	797
2	168	181	942
1	141	119	799

-4,6,L

18	57	55	859
15	101	100	69
14	156	171	103
13	64	50	752
12	98	110	31
9	123	125	801
8	116	120	890
7	113	101	842
6	95	127	824

-4,4,L

14	155	185	64
12	48	64	840
11	103	112	859
10	79	52	35
9	115	64	11
8	149	171	828
7	66	105	44
6	113	117	835
5	32	88	837
4	236	262	102
3	142	144	835
1	350	321	191
0	57	121	500

-4,3,L

16	111	69	894
15	79	85	28
14	129	124	219
12	116	129	948
11	45	61	816
10	114	133	798
9	99	122	84
8	105	112	778
7	254	240	814
6	247	214	999
5	344	343	187
4	541	489	33
3	281	227	123
2	338	281	149
1	158	99	216

-4,3,L

0	396	356	0
---	-----	-----	---

-4,2,L

14	156	145	935
12	82	85	960
10	225	215	863
9	79	78	977
8	171	186	998
7	137	174	802
6	327	313	868
5	169	156	912
4	407	378	957
3	364	304	963
2	372	330	225
1	159	160	834
0	58	43	500

-4,1,L

18	52	45	111
16	96	128	932
14	147	184	186
13	134	140	62
12	131	137	766
11	108	94	993
10	157	152	24
9	209	228	81
8	112	157	788
7	92	87	765
6	420	437	244
5	213	254	957
4	50	67	914
3	35	83	995
2	374	336	854
1	97	144	72
0	179	177	0

-4,0,L

17	138	156	250
16	102	76	0
14	227	259	500
13	285	255	750
10	99	87	500
9	175	184	250
8	168	143	500
6	81	75	500

5	406	406	250
4	341	280	500
3	95	52	250
1	233	229	750
0	407	362	0

-5,12,L

6	59	28	965
---	----	----	-----

-5,11,L

9	59	56	164
6	51	27	174
5	70	68	953
3	83	105	869
2	123	114	234

-5,10,L

8	85	85	905
7	82	107	992
5	86	84	0
1	114	112	104

-5,9,L

8	90	87	940
6	93	80	810
5	99	101	989
4	132	124	998
1	131	110	11
0	81	50	250

-5,8,L

8	150	165	887
6	76	83	170
4	153	152	902
0	61	73	750

-5,7,L

12	70	47	862
11	96	96	919
10	44	59	125
9	119	100	854
5	159	165	93
4	166	173	91

-5,7,L

3	124	111	180
0	141	170	250

-5,6,L

16	56	88	920
14	84	91	982
11	101	105	16
10	133	126	125
9	80	66	812
8	147	143	983
7	95	81	772
6	307	301	957
3	166	157	980
0	127	130	250

-5,5,L

14	147	109	796
13	66	82	917
12	129	120	835
10	77	82	142
9	85	67	142
8	100	105	934
7	208	190	107
5	84	127	222
4	105	113	929
3	132	96	769
2	125	145	903
1	43	51	37

-5,4,L

14	72	90	117
13	85	76	194
12	63	78	922
10	88	67	911
6	208	165	946
3	194	218	750
2	302	325	921
1	153	170	214
0	251	213	750

-5,3,L

14	157	150	233
13	165	181	83
12	115	136	201

11	102	95	966
10	79	68	975
7	71	46	845
6	121	105	153
5	200	221	878
4	118	76	772
3	202	208	34
1	139	116	764
0	104	156	250

-5,2,L

19	65	54	760
15	98	90	121
14	83	92	922
12	66	81	851
11	163	187	137
10	121	146	885
8	121	99	119
7	111	110	157
6	262	281	918
5	45	82	877
4	199	158	57
3	270	285	819
2	58	72	926
1	71	83	242
0	172	171	750

-5,1,L

16	82	103	812
14	121	127	145
13	56	26	879
12	190	193	762
10	173	160	963
9	165	175	24
8	125	126	957
7	115	114	824
6	165	168	950
5	109	100	195
4	204	187	182
3	248	261	889
2	255	225	1
1	100	42	231
0	412	389	750

-5,0,L

15	147	146	250
----	-----	-----	-----

-5,0,L

14	94	83	500
12	68	61	0
9	166	162	250
6	106	137	0
7	86	119	250
6	124	109	500
5	109	102	250
4	201	205	500
2	372	336	500
1	204	175	250

-6,11,L

7	71	64	105
2	50	58	4

-6,10,L

11	47	44	25
7	80	68	979
5	106	110	157
4	49	37	910
2	43	26	243
1	66	58	873

-6,9,L

11	76	95	792
7	70	70	772
5	110	74	37
2	70	91	100

-6,8,L

11	98	94	115
10	52	48	232
9	56	53	942
7	62	86	3
5	88	89	977
4	101	83	181
3	140	130	104
2	140	122	830
1	131	132	7
0	81	31	0

-6,7,L

9	125	122	179
---	-----	-----	-----

8	127	130	17
7	132	151	956
6	123	116	990
5	82	86	793
0	68	61	500

-6,6,L

10	90	90	56
6	117	138	119
5	107	149	192
4	103	115	89
1	201	206	875

-6,5,L

16	61	51	13
13	75	69	182
11	83	77	932
9	63	88	210
7	101	130	3
6	127	124	110
5	97	98	235
3	83	78	834
2	99	129	879
1	148	165	772
0	131	185	0

-6,4,L

15	75	79	961
12	92	89	17
11	153	130	134
10	63	46	894
9	63	88	912
8	216	254	165
6	89	101	232
3	84	91	145
2	100	94	838
0	48	72	500

-6,3,L

13	80	73	2
12	60	94	910
11	117	114	189
8	62	66	170
7	107	84	815
6	79	65	979

-6,3,L

5	136	138	875
4	69	96	55
2	183	190	1
1	130	145	804

-6,2,L

13	68	87	807
12	86	59	16
11	142	159	2
10	68	79	937
9	150	170	853
8	78	58	885
7	55	84	82
6	198	211	215
4	98	121	223
3	189	192	849
1	285	310	892
0	255	215	0

-6,1,L

15	51	51	906
12	87	58	243
11	62	73	3
10	70	71	925
8	81	76	895
6	182	174	88
5	61	81	168
4	183	178	154
3	81	97	33
2	255	262	207
1	112	112	238

-6,0,L

15	64	71	250
10	185	197	0
9	135	132	750
6	89	81	500
5	184	182	250
4	154	141	500
3	70	57	250
1	66	91	750
0	133	107	0

-7,11,L

0	66	64	250
---	----	----	-----

-7,8,L

9	72	67	947
6	54	60	161
3	85	105	899
1	74	76	190

-7,7,L

10	72	61	864
8	45	53	893
6	92	101	897
5	56	65	771
4	43	84	837
3	61	85	774
1	142	139	114

-7,6,L

13	76	103	958
9	68	61	970
8	82	43	231
7	100	116	188
6	98	109	894
5	54	71	59
4	58	50	753
2	99	86	960
1	36	85	990

-7,5,L

10	55	64	826
8	51	34	933
7	57	57	9
2	82	67	136
1	217	234	29

-7,4,L

11	91	92	817
10	101	86	132
7	87	114	246
6	137	149	236
4	112	119	878
2	138	136	971
1	121	152	153

-7,3,L

9	63	63	964
8	84	89	14
7	122	145	141
5	98	105	169
4	167	159	32
1	83	60	2
0	39	53	750

-7,2,L

14	53	51	20
11	62	63	752
4	118	85	86
3	117	143	886
2	145	128	111
1	204	218	776
0	114	125	250

-7,1,L

11	61	53	122
10	142	154	215
9	173	177	16
8	74	80	171
7	145	126	237
6	105	126	191
5	91	73	153
4	278	328	195
2	132	113	88
1	258	265	56
0	128	131	750

-7,0,L

13	53	89	250
9	99	90	250
8	80	74	500
7	70	96	250
6	143	183	500
3	56	37	250
2	203	194	0
1	88	95	750

-8,9,L

1	64	35	994
---	----	----	-----

-8,8,L

4	61	47	137
---	----	----	-----

-8,7,L

6	61	54	46
3	80	66	89

-8,6,L

9	66	82	823
4	62	56	91
2	72	63	202
1	88	74	204

-8,5,L

10	69	52	50
----	----	----	----

-8,4,L

5	63	95	769
4	77	75	819
1	131	146	217
0	124	120	0

-8,3,L

5	86	120	903
4	106	93	139
2	106	86	844
1	56	59	942
0	94	105	0

-8,2,L

9	69	94	868
8	104	111	808
6	123	123	114
4	153	178	951
2	155	155	804
1	89	83	161

-8,1,L

3	115	129	939
2	46	64	992
1	132	144	860
0	146	182	0

-8,0,L

8	83	101	500
5	81	95	250
4	157	173	0
2	110	131	500
1	138	130	250
0	165	158	500

-9,4,L

3	74	93	204
---	----	----	-----

-9,3,L

6	67	71	179
4	65	67	57

3	74	104	923
2	84	69	67
1	67	45	818
0	120	113	750

-9,2,L

1	74	94	884
---	----	----	-----

-9,1,L

4	64	55	219
---	----	----	-----

-9,0,L

2	69	68	0
---	----	----	---

Crystal data

Eupatorium, $C_{20}H_{26}O_{8.1/2}H_2O$, $M_r=403.4$, orthorhombic, $a=6.849(3)$,
 $b=28.479(7)$, $c=21.659(5)$ Å, $U=4224.6$ Å³, $D_c=1.27$, $D_m=1.26$ Mg m⁻³,
 $Z=8$, $F(000)=1720$, space group $P2_12_12_1$, $\mu(Mo-K\alpha)=1.07$ cm⁻¹.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 1

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	1637	1597	3	7	0	221	178	1	13	0	83	56	-3	1	1	116	105
6	0	0	155	174	4	7	0	175	169	2	13	0	386	372	-2	1	1	129	131
1	1	0	314	251	5	7	0	350	352	3	13	0	163	168	-1	1	1	80	92
2	1	0	78	37	6	7	0	93	98	5	13	0	202	218	-7	2	1	269	265
3	1	0	87	74	0	8	0	394	437	6	13	0	165	173	-6	2	1	410	430
6	1	0	172	202	1	8	0	242	246	7	13	0	61	64	-3	2	1	156	170
1	2	0	2297	2249	2	8	0	143	143	0	14	0	346	299	-2	2	1	72	65
2	2	0	297	252	4	8	0	175	150	1	14	0	242	231	-1	2	1	139	144
3	2	0	782	747	5	8	0	114	115	2	14	0	266	224	0	2	1	146	152
5	2	0	102	91	6	8	0	175	172	1	15	0	432	422	-7	3	1	78	95
6	2	0	346	363	7	8	0	59	65	2	15	0	759	757	-6	3	1	418	425
7	2	0	253	251	2	9	0	1073	1055	3	15	0	105	99	-5	3	1	137	127
1	3	0	348	326	3	9	0	353	333	4	15	0	390	405	-4	3	1	162	171
2	3	0	680	634	4	9	0	157	131	7	15	0	117	124	-3	3	1	168	173
3	3	0	292	254	6	9	0	167	185	0	16	0	713	701	-2	3	1	102	80
4	3	0	396	410	7	9	0	110	125	1	16	0	229	218	-1	3	1	142	129
7	3	0	106	112	0	10	0	83	37	5	16	0	136	140	-5	4	1	272	273
0	4	0	1877	1956	1	10	0	85	143	1	17	0	140	142	-4	4	1	105	122
1	4	0	578	588	2	10	0	250	209	2	17	0	356	338	-3	4	1	42	47
2	4	0	603	609	3	10	0	132	117	3	17	0	462	455	-2	4	1	109	77
3	4	0	606	577	4	10	0	133	98	4	17	0	104	93	-1	4	1	206	187
4	4	0	289	258	6	10	0	100	87	5	17	0	197	207	0	4	1	126	107
5	4	0	318	307	7	10	0	118	123	0	18	0	195	188	-6	5	1	108	107
1	5	0	124	138	8	10	0	86	91	2	18	0	322	331	-5	5	1	147	140
3	5	0	324	341	1	11	0	979	960	3	18	0	173	182	-4	5	1	41	56
4	5	0	170	182	2	11	0	224	205	6	18	0	119	116	-3	5	1	118	103
5	5	0	48	60	3	11	0	470	447	1	19	0	344	325	-2	5	1	89	90
6	5	0	110	85	4	11	0	76	95	2	19	0	63	67	-1	5	1	76	73
0	6	0	800	837	6	11	0	124	121	5	19	0	174	171	0	5	1	90	75
1	6	0	407	413	7	11	0	130	131	6	19	0	81	84	-7	6	1	180	215
2	6	0	494	522	0	12	0	62	69	0	20	0	441	453	-6	6	1	63	63
3	6	0	629	607	2	12	0	235	268	1	20	0	368	370	-5	6	1	84	97
4	6	0	507	487	3	12	0	119	152	2	20	0	133	158	-4	6	1	118	124
6	6	0	91	87	4	12	0	90	68	3	20	0	195	200	-3	6	1	171	166
1	7	0	50	39	6	12	0	119	110	5	20	0	225	227	-2	6	1	131	139
2	7	0	601	593	7	12	0	117	112	6	20	0	78	72	-1	6	1	218	187

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	6	1	1702	1730	-7	12	1	158	155	0	17	1	159	206	-4	24	1	46	50
-7	7	1	112	120	-5	12	1	140	137	-7	18	1	70	76	-3	24	1	53	45
-6	7	1	135	127	-3	12	1	255	276	-5	18	1	172	172	-2	24	1	58	63
-5	7	1	192	202	-2	12	1	718	721	-4	18	1	167	170	-1	24	1	85	104
-4	7	1	229	223	-1	12	1	981	1019	-3	18	1	172	173	-5	25	1	134	135
-3	7	1	292	316	0	12	1	1220	1228	-2	18	1	181	203	-3	25	1	60	87
-2	7	1	183	187	-7	13	1	100	105	-1	18	1	258	255	-2	25	1	231	225
-1	7	1	388	378	-5	13	1	93	89	0	18	1	129	134	-1	25	1	341	339
0	7	1	98	41	-4	13	1	112	129	-7	19	1	21	50	0	25	1	174	167
-7	8	1	99	110	-3	13	1	126	153	-6	19	1	129	126	-5	26	1	59	57
-5	8	1	109	80	-2	13	1	192	162	-5	19	1	130	138	-4	26	1	149	147
-4	8	1	170	166	-1	13	1	189	180	-4	19	1	79	76	0	26	1	187	173
-3	8	1	392	395	-7	14	1	100	106	-3	19	1	155	164	-5	27	1	93	84
-2	8	1	468	504	-5	14	1	165	172	-2	19	1	255	245	-4	27	1	82	84
-1	8	1	722	774	-4	14	1	239	243	-1	19	1	484	485	-3	27	1	136	123
0	8	1	589	614	-3	14	1	202	191	0	19	1	155	148	-2	27	1	114	96
-6	9	1	123	138	-2	14	1	534	503	-4	20	1	163	174	-1	27	1	172	158
-5	9	1	81	93	-1	14	1	544	543	-3	20	1	72	84	0	27	1	114	129
-4	9	1	84	79	0	14	1	179	175	-2	20	1	60	73	-4	28	1	82	107
-3	9	1	236	251	-6	15	1	106	103	-1	20	1	148	140	-1	28	1	129	148
-2	9	1	157	192	-5	15	1	205	186	0	20	1	57	47	0	28	1	76	69
-1	9	1	269	253	-4	15	1	114	121	-5	21	1	201	208	-2	30	1	69	70
0	9	1	207	270	-2	15	1	218	201	-4	21	1	150	161	-2	31	1	117	110
-8	10	1	87	89	-1	15	1	157	175	-3	21	1	155	147	0	31	1	78	76
-7	10	1	188	192	0	15	1	270	347	-2	21	1	190	193	-3	35	1	45	47
-5	10	1	238	231	-6	16	1	38	33	-1	21	1	197	190	1	0	2	1003	1101
-4	10	1	195	208	-4	16	1	158	168	0	21	1	273	262	2	0	2	536	532
-3	10	1	364	326	-3	16	1	348	332	-5	22	1	52	49	3	0	2	272	205
-2	10	1	410	427	-1	16	1	195	179	-4	22	1	105	99	4	0	2	252	282
-1	10	1	701	700	0	16	1	350	339	-3	22	1	155	160	5	0	2	366	344
0	10	1	19	33	-7	17	1	62	52	0	22	1	101	112	-7	1	2	75	89
-4	11	1	185	204	-5	17	1	99	93	-5	23	1	80	82	-6	1	2	122	111
-3	11	1	178	169	-4	17	1	56	52	-4	23	1	113	106	-5	1	2	161	156
-2	11	1	321	309	-3	17	1	294	293	-3	23	1	252	251	-4	1	2	204	160
-1	11	1	67	44	-2	17	1	483	473	-1	23	1	396	392	-3	1	2	319	263
0	11	1	818	841	-1	17	1	100	104	0	23	1	240	238	-2	1	2	300	294

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	6	2	545	512	-5	12	2	170	178	0	17	2	70	67	-4	2	3	360	330
-6	7	2	97	81	-4	12	2	188	170	-5	18	2	157	153	-3	2	3	585	583
-5	7	2	278	274	-3	12	2	222	251	-4	18	2	126	109	-2	2	3	324	298
-4	7	2	317	304	-2	12	2	299	304	-3	18	2	272	269	-1	2	3	1389	1365
-3	7	2	100	70	-1	12	2	105	124	-2	18	2	259	272	0	2	3	408	368
-2	7	2	305	326	0	12	2	662	663	-1	18	2	321	314	-6	3	3	42	64
-1	7	2	1300	1327	-7	13	2	126	114	0	18	2	362	354	-5	3	3	291	289
0	7	2	720	743	-6	13	2	201	197	-7	19	2	58	61	-4	3	3	509	495
-8	8	2	68	74	-5	13	2	133	126	-5	19	2	121	121	-3	3	3	357	319
-6	8	2	112	115	-4	13	2	96	109	-4	19	2	119	118	-2	3	3	765	761
-5	8	2	86	87	-3	13	2	361	364	-3	19	2	146	158	-1	3	3	1573	1670
-4	8	2	44	62	-2	13	2	138	161	-2	19	2	105	143	0	3	3	204	179
-3	8	2	207	206	-1	13	2	24	52	-1	19	2	254	244	-7	4	3	124	119
-2	8	2	392	289	0	13	2	297	301	0	19	2	80	73	-6	4	3	210	227
-1	8	2	357	332	-5	14	2	74	93	-5	20	2	98	95	-5	4	3	48	72
0	8	2	42	40	-4	14	2	135	128	-4	20	2	196	190	-4	4	3	116	87
-5	9	2	272	264	-2	14	2	413	403	-2	20	2	157	175	-3	4	3	590	505
-3	9	2	98	82	-1	14	2	85	63	-1	20	2	60	72	-1	4	3	470	510
-2	9	2	717	661	0	14	2	441	441	-3	21	2	111	134	0	4	3	594	559
-1	9	2	413	432	-6	15	2	78	85	-2	21	2	99	108	-8	5	3	112	112
-6	10	2	52	41	-5	15	2	157	153	-1	21	2	127	131	-7	5	3	118	113
-5	10	2	159	171	-4	15	2	210	212	0	21	2	69	30	-6	5	3	146	131
-4	10	2	100	100	-3	15	2	273	252	-5	22	2	113	116	-5	5	3	338	333
-3	10	2	170	171	-2	15	2	85	79	-4	22	2	66	59	-4	5	3	191	204
-2	10	2	151	155	-1	15	2	244	229	-3	22	2	143	161	-2	5	3	395	367
-1	10	2	355	332	0	15	2	621	618	-2	22	2	179	196	-1	5	3	686	750
0	10	2	523	489	-5	16	2	187	193	-1	22	2	185	194	0	5	3	239	253
-7	11	2	128	108	-3	16	2	304	288	0	22	2	218	233	-7	6	3	125	134
-5	11	2	210	213	-2	16	2	117	97	-4	23	2	151	139	-6	6	3	145	157
-4	11	2	122	112	-1	16	2	222	209	-3	23	2	82	76	-5	6	3	374	402
-3	11	2	391	366	-7	17	2	122	127	-2	23	2	96	91	-4	6	3	153	151
-2	11	2	716	654	-5	17	2	137	133	-2	23	2	230	227	-3	6	3	527	513
-1	11	2	659	652	-4	17	2	183	181	-6	24	2	94	68	-2	6	3	223	214
0	11	2	325	378	-3	17	2	128	161	-5	24	2	183	186	-1	6	3	708	736
-7	12	2	168	177	-2	17	2	102	83	-3	24	2	160	166	0	6	3	319	370
-6	12	2	95	102	-1	17	2	98	106	-2	24	2	191	195	-6	7	3	76	105

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	7	3	190	188	-7	12	3	121	119	-5	17	3	70	92	-5	24	3	83	84
-4	7	3	145	125	-6	12	3	171	180	-4	17	3	150	158	-4	24	3	143	136
-3	7	3	157	144	-5	12	3	154	156	-3	17	3	150	149	-3	24	3	53	70
-2	7	3	393	390	-4	12	3	136	132	-2	17	3	185	158	-2	24	3	145	146
-1	7	3	329	329	-3	12	3	191	187	-1	17	3	65	84	-1	24	3	85	86
0	7	3	112	115	-2	12	3	216	205	0	17	3	80	89	0	24	3	211	221
-8	8	3	7	47	-1	12	3	244	241	-7	18	3	84	80	-4	25	3	200	191
-6	8	3	271	276	0	12	3	367	297	-5	18	3	88	79	-3	25	3	58	67
-5	8	3	110	112	-7	13	3	133	133	-4	18	3	154	157	-2	25	3	158	145
-3	8	3	100	127	-6	13	3	73	82	-3	18	3	261	279	-1	25	3	95	95
-2	8	3	247	209	-5	13	3	220	218	-2	18	3	105	114	0	25	3	234	238
-1	8	3	1152	1160	-4	13	3	139	159	-1	18	3	269	240	-4	26	3	103	115
0	8	3	54	50	-3	13	3	402	386	-6	19	3	148	140	-3	26	3	74	56
-6	9	3	125	120	-2	13	3	50	52	-5	19	3	228	232	-2	26	3	112	110
-5	9	3	177	196	-1	13	3	343	319	-4	19	3	184	190	-1	26	3	223	218
-4	9	3	109	107	0	13	3	47	54	-4	19	3	176	168	-4	27	3	73	63
-3	9	3	139	130	-6	14	3	175	174	-2	19	3	71	79	-3	27	3	59	59
-2	9	3	103	87	-5	14	3	196	197	-1	19	3	406	390	-2	27	3	76	78
-1	9	3	389	401	-4	14	3	240	220	0	19	3	129	166	-1	27	3	104	114
0	9	3	100	89	-3	14	3	337	316	-4	20	3	160	169	-5	28	3	111	119
-8	10	3	84	106	-2	14	3	364	372	-3	20	3	112	96	0	28	3	142	123
-7	10	3	136	127	-1	14	3	160	144	-2	20	3	92	79	0	30	3	54	56
-6	10	3	162	150	0	14	3	209	158	-1	20	3	97	96	-2	31	3	47	50
-5	10	3	174	175	-7	15	3	128	121	0	20	3	137	102	-2	32	3	35	55
-4	10	3	206	219	-6	15	3	132	129	-5	21	3	77	68	0	33	3	69	45
-3	10	3	317	296	-5	15	3	92	79	-4	21	3	156	138	0	0	4	1307	1263
-2	10	3	377	401	-4	15	3	208	241	-3	21	3	326	326	1	0	4	1547	1565
-1	10	3	261	257	-3	15	3	221	200	-2	21	3	347	336	2	0	4	759	779
0	10	3	148	129	-2	15	3	355	350	-1	21	3	238	226	3	0	4	309	312
-6	11	3	202	212	-1	15	3	172	131	0	21	3	227	212	4	0	4	237	222
-5	11	3	97	87	0	15	3	153	136	-4	22	3	133	140	5	0	4	237	249
-4	11	3	177	184	-5	16	3	85	100	-3	22	3	75	77	6	0	4	211	219
-3	11	3	165	172	-4	16	3	103	103	-5	23	3	112	136	-6	1	4	140	141
-2	11	3	323	340	-3	16	3	77	81	-4	23	3	159	169	-5	1	4	254	237
-1	11	3	93	92	-2	16	3	358	361	-3	23	3	130	128	-4	1	4	245	275
0	11	3	324	325	0	16	3	357	348	-1	23	3	167	146	-3	1	4	134	133

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	6	4	237	202	-2	11	4	409	381	-2	16	4	338	337	-2	23	4	57	54	-3	1	5	93	157
-2	6	4	249	279	-1	11	4	607	611	-1	16	4	80	97	-1	23	4	122	141	-2	1	5	841	818
-1	6	4	704	750	0	11	4	825	875	0	16	4	273	268	0	23	4	26	46	-1	1	5	309	269
0	6	4	618	664	-6	12	4	139	136	-5	17	4	45	66	-4	24	4	99	118	0	1	5	112	190
-6	7	4	162	175	-5	12	4	218	225	-4	17	4	75	92	-1	24	4	241	249	-7	2	5	115	108
-5	7	4	314	310	-4	12	4	193	186	-3	17	4	222	225	0	24	4	242	233	-6	2	5	130	127
-4	7	4	214	204	-3	12	4	365	357	-2	17	4	164	155	-5	25	4	103	113	-5	2	5	145	150
-3	7	4	432	436	-2	12	4	43	51	-1	17	4	329	343	-4	25	4	93	87	-4	2	5	182	173
-2	7	4	388	362	-1	12	4	341	345	0	17	4	109	106	-2	25	4	194	180	-3	2	5	664	667
-1	7	4	535	538	0	12	4	576	591	-4	18	4	113	98	-5	26	4	99	92	-2	2	5	1322	1326
-6	8	4	142	147	-6	13	4	251	244	-2	18	4	205	191	-4	26	4	80	69	-1	2	5	844	856
-5	8	4	206	214	-5	13	4	143	140	-1	18	4	153	151	-3	26	4	76	94	0	2	5	406	415
-4	8	4	58	51	-4	13	4	210	199	0	18	4	149	162	-2	26	4	157	164	-8	3	5	88	103
-3	8	4	88	112	-3	13	4	144	132	-6	19	4	79	63	-1	26	4	226	216	-6	3	5	200	203
-2	8	4	343	343	-2	13	4	235	210	-5	19	4	78	83	0	26	4	142	140	-5	3	5	286	276
-1	8	4	327	317	-1	13	4	483	466	-2	19	4	74	74	-5	27	4	123	129	-4	3	5	109	82
0	8	4	125	139	0	13	4	176	153	-1	19	4	72	72	-4	27	4	67	64	-3	3	5	254	233
-6	9	4	242	243	-7	14	4	117	116	0	19	4	105	124	-2	27	4	81	89	-2	3	5	225	227
-5	9	4	119	140	-6	14	4	123	107	-6	20	4	125	131	-3	28	4	91	84	-1	3	5	100	72
-4	9	4	180	169	-5	14	4	146	119	-5	20	4	154	154	-2	28	4	73	77	0	3	5	129	156
-3	9	4	126	164	-4	14	4	168	145	-4	20	4	127	135	-1	28	4	90	98	-7	4	5	150	150
-2	9	4	321	357	-3	14	4	362	369	-3	20	4	160	174	0	28	4	101	81	-6	4	5	207	220
-1	9	4	464	463	-2	14	4	179	145	-2	20	4	184	181	-4	29	4	81	73	-5	4	5	85	72
0	9	4	568	590	-1	14	4	494	449	-1	20	4	273	285	-1	29	4	49	57	-4	4	5	308	296
-6	10	4	220	218	0	14	4	135	140	-4	21	4	204	212	0	29	4	106	102	-3	4	5	643	629
-5	10	4	192	178	-6	15	4	119	107	-3	21	4	132	141	-2	30	4	56	41	-2	4	5	613	608
-4	10	4	81	81	-5	15	4	63	68	-2	21	4	94	94	0	30	4	100	93	-1	4	5	602	656
-3	10	4	374	382	-4	15	4	79	64	-1	21	4	311	322	1	0	5	354	404	0	4	5	124	167
-2	10	4	556	538	-3	15	4	173	162	0	21	4	201	197	2	0	5	374	371	-6	5	5	264	272
-1	10	4	469	485	-2	15	4	177	193	-4	22	4	107	111	4	0	5	60	15	-5	5	5	159	157
0	10	4	378	382	-1	15	4	211	173	-3	22	4	255	256	5	0	5	87	87	-4	5	5	115	117
-7	11	4	70	67	0	15	4	816	808	-2	22	4	103	92	6	0	5	163	170	-3	5	5	162	174
-6	11	4	81	69	-7	16	4	113	115	-1	22	4	280	282	-7	1	5	22	29	-2	5	5	394	409
-5	11	4	158	160	-6	16	4	103	92	0	22	4	212	193	-6	1	5	126	147	-1	5	5	734	786
-4	11	4	248	242	-4	16	4	287	305	-5	23	4	75	73	-5	1	5	187	182	0	5	5	875	868
-3	11	4	319	333	-3	16	4	266	271	-3	23	4	148	157	-4	1	5	150	163	-7	6	5	98	94

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-6	6	5	125	125	-5	11	5	119	124	-7	17	5	90	105	0	24	5	464	494
-5	6	5	239	228	-4	11	5	296	295	-6	17	5	90	78	-5	25	5	73	74
-4	6	5	86	110	-3	11	5	304	280	-4	17	5	274	282	-3	25	5	96	104
-3	6	5	176	194	-2	11	5	303	299	-3	17	5	176	184	-2	25	5	149	136
-2	6	5	438	419	-1	11	5	316	341	-2	17	5	154	138	-1	25	5	220	228
-1	6	5	177	198	-6	12	5	139	132	0	17	5	57	44	0	25	5	111	111
0	6	5	296	235	-4	12	5	139	143	-5	18	5	129	135	-5	26	5	85	85
-8	7	5	103	94	-3	12	5	156	163	-2	18	5	137	112	-3	26	5	44	52
-6	7	5	250	241	-2	12	5	115	118	-1	18	5	178	174	-2	26	5	136	146
-4	7	5	136	127	-1	12	5	448	435	0	18	5	110	109	-1	26	5	100	81
-3	7	5	265	240	-6	13	5	113	128	-5	19	5	98	81	0	26	5	82	85
-2	7	5	168	162	-5	13	5	110	101	-4	19	5	177	192	-5	27	5	113	104
-1	7	5	277	274	-4	13	5	163	151	-2	19	5	143	143	-3	27	5	112	106
0	7	5	198	185	-3	13	5	244	256	-1	19	5	103	109	-2	27	5	106	118
-8	8	5	103	91	-2	13	5	272	229	-5	20	5	101	96	-1	27	5	151	159
-5	8	5	129	123	-1	13	5	417	383	-4	20	5	300	288	-2	28	5	95	84
-4	8	5	375	373	0	13	5	814	787	-3	20	5	224	220	-1	28	5	111	104
-3	8	5	326	305	-6	14	5	108	117	-2	20	5	148	163	-2	30	5	78	75
-2	8	5	215	249	-4	14	5	78	84	-1	20	5	204	206	0	31	5	94	90
-1	8	5	553	531	-3	14	5	129	126	0	20	5	44	41	-2	32	5	83	72
0	8	5	540	568	-2	14	5	44	34	-5	21	5	134	131	0	0	6	106	160
-7	9	5	120	120	-1	14	5	290	293	-3	21	5	128	136	1	0	6	446	474
-6	9	5	182	179	0	14	5	747	756	-2	21	5	156	153	2	0	6	769	782
-5	9	5	211	199	-5	15	5	70	81	-1	21	5	242	232	-7	1	6	110	114
-4	9	5	175	202	-4	15	5	169	163	-5	22	5	44	64	-6	1	6	302	296
-3	9	5	277	293	-3	15	5	107	96	-4	22	5	82	100	-4	1	6	130	132
-2	9	5	247	293	-2	15	5	211	223	-3	22	5	196	185	-3	1	6	291	274
-1	9	5	1068	1055	-1	15	5	249	250	-2	22	5	289	271	-2	1	6	439	397
0	9	5	215	187	0	15	5	255	224	-1	22	5	226	237	-1	1	6	729	744
-6	10	5	99	102	-7	16	5	49	54	0	22	5	438	440	0	1	6	363	412
-4	10	5	231	240	-5	16	5	93	96	-1	23	5	75	79	-5	2	6	177	191
-3	10	5	240	231	-4	16	5	83	100	0	23	5	253	262	-4	2	6	92	93
-2	10	5	399	424	-3	16	5	168	170	-5	24	5	103	102	-3	2	6	339	354
-1	10	5	342	343	-2	16	5	130	107	-3	24	5	66	57	-2	2	6	108	111
0	10	5	602	613	-1	16	5	183	172	-2	24	5	70	73	-1	2	6	476	552
-6	11	5	295	289	0	16	5	129	131	-1	24	5	92	116	0	2	6	218	239

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-5	8	6	255	245	0	13	6	381	364	-5	20	6	91	95	0	27	6	94	121	-6	4	7	131	142
-4	8	6	320	272	-5	14	6	200	194	-4	20	6	181	192	-2	28	6	65	76	-4	4	7	344	316
-3	8	6	57	17	-4	14	6	334	348	-3	20	6	103	106	-1	28	6	65	81	-3	4	7	342	343
-2	8	6	435	426	-3	14	6	60	88	-1	20	6	190	164	0	28	6	95	83	-2	4	7	125	137
-1	8	6	336	346	-2	14	6	242	227	0	20	6	97	82	-2	29	6	42	55	-1	4	7	438	432
0	8	6	534	560	-1	14	6	40	59	-5	21	6	81	80	-1	29	6	125	121	0	4	7	191	196
-6	9	6	54	60	0	14	6	60	82	-4	21	6	147	150	-2	30	6	66	75	-6	5	7	202	206
-5	9	6	82	85	-5	15	6	157	164	-3	21	6	191	190	-2	31	6	97	75	-4	5	7	327	322
-4	9	6	188	173	-3	15	6	57	59	-2	21	6	90	91	0	34	6	66	66	-3	5	7	470	428
-3	9	6	171	188	-2	15	6	124	120	-1	21	6	213	201	1	0	7	121	172	-2	5	7	282	251
-2	9	6	76	85	-1	15	6	206	196	0	21	6	385	410	2	0	7	1333	1299	-1	5	7	320	309
-1	9	6	345	368	0	15	6	368	377	-5	22	6	99	110	3	0	7	403	403	0	5	7	425	485
0	9	6	242	223	-7	16	6	94	99	-4	22	6	107	113	4	0	7	79	49	-7	6	7	83	100
-7	10	6	136	146	-5	16	6	67	68	-3	22	6	58	52	8	0	7	93	109	-5	6	7	166	150
-5	10	6	106	106	-4	16	6	118	119	-2	22	6	90	82	-7	1	7	84	75	-4	6	7	254	272
-4	10	6	193	234	-3	16	6	154	170	-1	22	6	172	160	-5	1	7	85	108	-3	6	7	252	258
-3	10	6	339	335	-1	16	6	42	43	-3	23	6	82	92	-3	1	7	362	347	-2	6	7	248	219
-2	10	6	334	302	0	16	6	271	254	-2	23	6	340	343	-2	1	7	498	490	-1	6	7	325	301
-1	10	6	957	955	-6	17	6	93	92	-1	23	6	340	349	-1	1	7	329	261	0	6	7	679	692
0	10	6	358	355	-5	17	6	93	112	-4	24	6	97	103	0	1	7	95	140	-7	7	7	114	114
-4	11	6	76	66	-4	17	6	162	170	-2	24	6	109	99	-7	2	7	101	102	-6	7	7	200	209
-3	11	6	121	98	-3	17	6	206	195	-1	24	6	176	177	-6	2	7	120	125	-5	7	7	230	227
-2	11	6	141	129	-2	17	6	147	148	0	24	6	71	34	-5	2	7	138	138	-4	7	7	222	201
-1	11	6	187	188	-1	17	6	273	271	-5	25	6	112	108	-4	2	7	163	137	-3	7	7	141	162
-7	12	6	96	95	0	17	6	142	136	-4	25	6	161	148	-3	2	7	809	762	-2	7	7	419	436
-6	12	6	132	126	-7	18	6	41	48	-3	25	6	102	107	-2	2	7	722	666	-1	7	7	584	608
-5	12	6	296	297	-6	18	6	68	79	-2	25	6	72	76	-1	2	7	611	644	0	7	7	509	518
-4	12	6	178	187	-5	18	6	112	109	-1	25	6	31	45	0	2	7	207	203	-5	8	7	96	84
-3	12	6	132	141	-4	18	6	289	285	0	25	6	252	259	-6	3	7	56	49	-4	8	7	277	285
-2	12	6	129	170	-3	18	6	78	76	-5	26	6	116	100	-5	3	7	134	144	-3	8	7	168	198
-1	12	6	300	298	-2	18	6	46	62	-3	26	6	53	44	-4	3	7	99	102	-2	8	7	84	47
0	12	6	77	60	-1	18	6	113	118	-2	26	6	107	119	-3	3	7	330	317	-1	8	7	184	155
-5	13	6	63	80	-4	19	6	197	209	-1	26	6	126	120	-2	3	7	619	572	0	8	7	183	183
-4	13	6	188	197	-3	19	6	280	281	0	26	6	103	82	-1	3	7	262	191	-7	9	7	182	193
-2	13	6	136	117	-1	19	6	192	187	-3	27	6	112	101	0	3	7	106	96	-5	9	7	91	112
-1	13	6	279	257	0	19	6	293	287	-1	27	6	50	67	-7	4	7	124	137	-4	9	7	186	191

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	9	7	116	118	-2	15	7	308	305	-2	25	7	161	154	-4	3	8	360	421
-2	9	7	368	346	-1	15	7	161	137	-1	25	7	82	96	-3	3	8	370	381
-1	9	7	600	586	0	15	7	227	211	-4	26	7	128	114	-2	3	8	540	535
0	9	7	390	390	-5	16	7	89	86	-2	26	7	57	72	-1	3	8	499	478
-6	10	7	69	74	-4	16	7	146	148	0	26	7	139	142	0	3	8	386	394
-5	10	7	168	163	-3	16	7	142	137	-3	27	7	73	63	-8	4	8	77	78
-4	10	7	60	79	-1	16	7	197	194	-2	27	7	137	143	-6	4	8	151	154
-2	10	7	91	82	0	16	7	97	77	-1	28	7	84	87	-5	4	8	206	205
-1	10	7	483	456	-4	17	7	180	182	-4	29	7	86	81	-4	4	8	100	115
0	10	7	127	105	-3	17	7	127	123	0	29	7	122	113	-3	4	8	438	435
-6	11	7	251	265	-2	17	7	78	83	-1	30	7	20	25	-2	4	8	256	307
-5	11	7	216	237	-1	17	7	208	206	-1	31	7	57	48	-1	4	8	188	224
-4	11	7	202	203	0	17	7	87	87	-1	32	7	41	24	0	4	8	86	85
-3	11	7	119	124	-3	18	7	257	265	0	0	8	120	155	-7	5	8	113	122
-2	11	7	405	413	-2	18	7	113	108	1	0	8	166	205	-5	5	8	126	114
-1	11	7	701	682	-1	18	7	245	245	2	0	8	264	223	-4	5	8	169	191
0	11	7	625	594	0	18	7	290	298	3	0	8	100	104	-3	5	8	84	67
-5	12	7	47	37	-4	19	7	173	166	4	0	8	93	103	-2	5	8	322	281
-4	12	7	169	168	-3	19	7	176	181	5	0	8	117	107	-1	5	8	175	163
-3	12	7	75	81	0	19	7	176	184	7	0	8	104	113	0	5	8	332	353
-2	12	7	44	23	-4	20	7	101	98	-8	1	8	98	74	-6	6	8	105	108
-1	12	7	210	188	-3	20	7	221	239	-7	1	8	117	119	-3	6	8	402	396
0	12	7	53	89	-2	20	7	227	239	-5	1	8	242	239	-2	6	8	455	453
-7	13	7	92	98	-1	20	7	63	68	-4	1	8	211	213	-1	6	8	290	278
-5	13	7	478	471	-4	21	7	80	83	-3	1	8	535	523	0	6	8	294	229
-4	13	7	292	300	-1	21	7	212	190	-2	1	8	771	759	-7	7	8	139	145
-2	13	7	223	217	0	21	7	155	155	-1	1	8	315	334	-6	7	8	70	88
-1	13	7	115	99	-4	22	7	94	107	0	1	8	401	361	-5	7	8	108	107
0	13	7	955	943	-3	22	7	192	200	-5	2	8	100	103	-4	7	8	408	405
-5	14	7	105	105	-2	22	7	233	237	-4	2	8	118	106	-3	7	8	372	362
-3	14	7	124	134	-1	22	7	206	194	-3	2	8	348	365	-2	7	8	205	217
-2	14	7	158	199	0	22	7	177	169	-2	2	8	173	138	-1	7	8	288	276
-1	14	7	223	221	-1	23	7	165	152	-1	2	8	200	202	0	7	8	52	56
0	14	7	210	183	-4	24	7	114	103	0	2	8	153	160	-7	8	8	99	95
-6	15	7	89	94	-3	24	7	62	66	-6	3	8	84	79	-6	8	8	106	119
-4	15	7	311	306	-4	25	7	62	75	-5	3	8	228	235	-5	8	8	286	294

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	13	8	343	326	-4	20	8	79	89	0	30	8	126	113	-6	5	9	118	120
-6	14	8	77	67	-3	20	8	171	183	1	0	9	346	358	-5	5	9	262	258
-5	14	8	74	75	-2	20	8	130	146	2	0	9	319	329	-4	5	9	252	234
-4	14	8	194	222	-1	20	8	175	181	3	0	9	412	412	-3	5	9	371	364
-3	14	8	103	101	0	20	8	145	163	4	0	9	70	79	-2	5	9	396	350
-2	14	8	153	169	-4	21	8	99	103	5	0	9	314	338	-1	5	9	296	248
-1	14	8	121	117	-3	21	8	71	67	7	0	9	93	95	0	5	9	155	204
-6	15	8	73	92	-2	21	8	242	256	-7	1	9	96	107	-7	6	9	122	135
-5	15	8	102	110	-1	21	8	192	194	-5	1	9	106	127	-6	6	9	94	83
-4	15	8	237	250	0	21	8	109	100	-4	1	9	80	66	-4	6	9	294	290
-3	15	8	139	131	-2	22	8	115	102	-3	1	9	261	247	-2	6	9	432	406
-2	15	8	187	182	-1	22	8	186	193	-2	1	9	195	196	-1	6	9	523	513
-1	15	8	108	90	0	22	8	190	196	-1	1	9	189	147	0	6	9	355	403
0	15	8	82	90	-4	23	8	104	103	0	1	9	105	109	-6	7	9	91	90
-5	16	8	108	96	-3	23	8	80	86	-7	2	9	122	131	-5	7	9	117	94
-4	16	8	118	129	-2	23	8	113	107	-6	2	9	113	107	-4	7	9	221	239
-3	16	8	199	206	-1	23	8	234	241	-5	2	9	170	156	-3	7	9	272	283
-2	16	8	157	157	0	23	8	105	120	-4	2	9	104	89	-2	7	9	373	375
-1	16	8	249	240	-3	24	8	70	60	-3	2	9	202	213	-1	7	9	114	102
0	16	8	89	95	-2	24	8	143	149	-2	2	9	356	318	0	7	9	126	29
-5	17	8	143	133	-1	24	8	124	120	-1	2	9	410	410	-5	8	9	178	167
-4	17	8	165	169	0	24	8	138	127	0	2	9	138	69	-4	8	9	181	186
-3	17	8	149	154	-4	25	8	104	77	-6	3	9	76	75	-3	8	9	123	130
-2	17	8	56	70	-2	25	8	196	204	-5	3	9	95	87	-2	8	9	183	177
-1	17	8	244	238	-1	25	8	71	74	-4	3	9	137	150	0	8	9	53	53
0	17	8	96	77	0	25	8	134	129	-3	3	9	339	363	-5	9	9	141	165
-4	18	8	105	114	-2	26	8	78	86	-2	3	9	98	71	-4	9	9	107	140
-3	18	8	264	256	-1	26	8	55	47	-1	3	9	350	325	-3	9	9	269	276
-2	18	8	132	124	-4	27	8	78	79	0	3	9	357	324	-2	9	9	123	124
-1	18	8	125	125	-3	27	8	76	71	-7	4	9	150	139	-1	9	9	189	168
0	18	8	275	276	-2	28	8	86	77	-5	4	9	346	337	0	9	9	894	869
-5	19	8	101	89	-1	28	8	94	72	-4	4	9	303	278	-6	10	9	67	79
-4	19	8	156	165	0	28	8	54	49	-3	4	9	525	501	-5	10	9	75	92
-3	19	8	124	121	-4	29	8	79	63	-2	4	9	262	254	-4	10	9	78	97
-1	19	8	94	85	-2	29	8	75	87	-1	4	9	167	152	-2	10	9	165	144
0	19	8	117	147	-3	30	8	78	80	0	4	9	464	475	-1	10	9	336	337

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	17	9	111	123	-3	28	9	55	40	-3	5	10	329	330	-2	10	10	127	105
0	17	9	338	314	-2	28	9	78	73	-2	5	10	585	559	-1	10	10	370	347
-5	18	9	122	130	-1	29	9	48	58	-1	5	10	288	292	0	10	10	470	428
-3	18	9	175	170	-2	31	9	92	71	0	5	10	189	223	-5	11	10	89	92
-2	18	9	174	197	-1	31	9	51	52	-7	6	10	105	100	-4	11	10	195	185
-1	18	9	201	200	-2	32	9	64	57	-6	6	10	125	111	-3	11	10	149	149
0	18	9	33	27	0	0	10	490	477	-5	6	10	211	228	-2	11	10	145	139
-5	19	9	88	70	1	0	10	67	91	-4	6	10	283	264	-1	11	10	255	259
-4	19	9	123	131	2	0	10	305	312	-3	6	10	125	117	0	11	10	233	229
-3	19	9	154	167	4	0	10	320	331	-2	6	10	128	133	-5	12	10	258	259
-2	19	9	197	192	5	0	10	163	180	-1	6	10	530	493	-4	12	10	113	114
0	19	9	107	107	-5	1	10	125	141	0	6	10	268	207	-3	12	10	288	289
-5	20	9	105	124	-4	1	10	214	225	-6	7	10	45	34	-2	12	10	381	424
-4	20	9	154	153	-3	1	10	248	262	-5	7	10	136	123	-1	12	10	180	196
-3	20	9	206	209	-2	1	10	140	170	-4	7	10	194	196	0	12	10	130	155
-1	20	9	94	103	-1	1	10	343	342	-2	7	10	86	104	-5	13	10	103	94
0	20	9	248	250	0	1	10	421	482	-1	7	10	350	335	-4	13	10	168	166
-3	21	9	36	66	-5	2	10	190	181	-6	8	10	84	108	-3	13	10	109	123
-1	21	9	247	262	-3	2	10	122	135	-5	8	10	72	89	-2	13	10	65	78
0	21	9	284	270	-2	2	10	79	87	-4	8	10	232	208	-1	13	10	129	139
-4	22	9	96	94	-1	2	10	88	105	-3	8	10	348	328	-6	14	10	123	127
-3	22	9	19	46	0	2	10	408	438	-2	8	10	264	291	-5	14	10	165	173
-2	22	9	143	151	-5	3	10	294	302	-1	8	10	124	108	-4	14	10	208	194
-1	22	9	232	241	-4	3	10	236	237	-7	9	10	100	88	-3	14	10	338	336
-4	23	9	86	81	-3	3	10	584	572	-6	9	10	70	76	-2	14	10	247	257
-3	23	9	51	45	-2	3	10	373	363	-5	9	10	128	125	-1	14	10	217	216
-5	24	9	90	93	-1	3	10	138	152	-4	9	10	157	150	0	14	10	253	261
-3	24	9	80	75	0	3	10	85	52	-3	9	10	259	238	-5	15	10	65	70
-2	24	9	184	183	-4	4	10	170	145	-2	9	10	200	197	-2	15	10	72	56
-1	24	9	168	190	-2	4	10	213	222	-1	9	10	242	253	-1	15	10	93	111
-2	25	9	100	107	-1	4	10	283	259	0	9	10	131	154	0	15	10	45	41
-4	26	9	110	101	0	4	10	563	539	-7	10	10	84	71	-4	16	10	106	117
-3	26	9	76	76	-7	5	10	96	91	-6	10	10	110	97	-3	16	10	83	87
-2	26	9	130	132	-6	5	10	110	112	-5	10	10	75	85	-2	16	10	184	174
-1	26	9	101	105	-5	5	10	235	251	-4	10	10	222	214	-1	16	10	238	227
-3	27	9	76	86	-4	5	10	206	206	-3	10	10	437	427	0	16	10	365	345

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	27	10	74	70	-2	5	11	149	141	-4	11	11	65	78	-1	17	11	128	137	-5	1	12	201	209
-2	28	10	103	84	-1	5	11	221	238	-3	11	11	308	319	-4	1	12	177	199	-4	1	12	40	45
-1	28	10	75	41	0	5	11	295	326	-2	11	11	205	187	-2	18	11	234	225	-2	1	12	136	126
0	30	10	124	112	-5	6	11	188	196	-1	11	11	131	134	0	18	11	70	97	-1	1	12	202	228
1	0	11	836	824	-3	6	11	211	213	0	11	11	192	131	-4	19	11	132	145	0	1	12	291	284
2	0	11	362	354	-2	6	11	205	227	-3	12	11	149	171	-3	19	11	107	84	-6	2	12	108	112
3	0	11	270	262	-1	6	11	404	369	-2	12	11	207	213	-2	19	11	280	275	-5	2	12	139	117
4	0	11	95	52	0	6	11	153	126	-1	12	11	212	223	-1	19	11	143	147	-4	2	12	209	214
5	0	11	227	258	-6	7	11	105	123	0	12	11	201	201	-4	20	11	119	113	-3	2	12	207	206
-4	1	11	293	281	-5	7	11	200	223	-6	13	11	92	92	-3	20	11	100	111	-2	2	12	104	103
-3	1	11	277	291	-4	7	11	249	273	-4	13	11	143	152	-1	20	11	89	90	-1	2	12	311	314
-2	1	11	552	531	-3	7	11	158	177	-3	13	11	198	193	0	20	11	250	248	0	2	12	205	135
-1	1	11	491	453	-2	7	11	102	83	-2	13	11	90	79	-2	21	11	184	200	-5	3	12	67	70
0	1	11	364	368	-1	7	11	426	425	-1	13	11	336	344	0	21	11	128	137	-3	3	12	192	229
-6	2	11	102	106	0	7	11	143	138	0	13	11	322	312	-4	22	11	76	72	-2	3	12	316	306
-5	2	11	210	232	-7	8	11	137	128	-5	14	11	145	135	-3	22	11	91	85	-1	3	12	215	222
-4	2	11	245	236	-5	8	11	122	123	-4	14	11	65	57	-2	22	11	91	97	-6	4	12	48	54
-3	2	11	355	349	-4	8	11	88	94	-3	14	11	138	144	-2	23	11	67	71	-5	4	12	75	81
-2	2	11	282	287	-3	8	11	392	393	-1	14	11	262	260	-1	23	11	120	124	-4	4	12	143	133
-1	2	11	326	307	-1	8	11	185	178	0	14	11	78	55	-2	24	11	132	136	-3	4	12	136	161
0	2	11	590	543	0	8	11	239	230	-6	15	11	66	53	0	24	11	134	134	-2	4	12	245	226
-5	3	11	106	128	-7	9	11	103	94	-5	15	11	107	106	-2	25	11	71	62	-1	4	12	313	288
-4	3	11	233	248	-6	9	11	140	147	-4	15	11	109	119	-3	26	11	105	107	0	4	12	119	141
-3	3	11	215	213	-5	9	11	75	61	-3	15	11	143	130	-1	26	11	100	94	-5	5	12	217	217
-2	3	11	318	326	-4	9	11	151	174	-2	15	11	251	238	-1	27	11	72	67	-4	5	12	262	271
-1	3	11	96	91	-3	9	11	363	384	-1	15	11	253	255	-3	28	11	102	99	-3	5	12	154	157
0	3	11	479	444	-2	9	11	344	292	0	15	11	434	425	0	28	11	101	106	-2	5	12	241	221
-6	4	11	138	148	-1	9	11	145	147	-5	16	11	102	97	0	29	11	100	88	-1	5	12	179	187
-5	4	11	215	213	0	9	11	306	258	-4	16	11	110	107	-2	30	11	45	47	-7	6	12	64	56
-3	4	11	181	202	-5	10	11	102	97	-2	16	11	186	210	-1	31	11	48	49	-5	6	12	163	149
-2	4	11	269	267	-3	10	11	171	184	-1	16	11	238	250	0	0	12	428	414	-3	6	12	45	37
-1	4	11	228	170	-2	10	11	62	66	0	16	11	264	270	1	0	12	352	371	-2	6	12	194	205
0	4	11	68	49	-1	10	11	178	177	-5	17	11	101	108	2	0	12	220	204	-1	6	12	62	28
-5	5	11	62	60	0	10	11	98	85	-4	17	11	146	146	3	0	12	157	200	0	6	12	318	356
-4	5	11	144	115	-6	11	11	113	112	-3	17	11	156	159	4	0	12	87	74	-7	7	12	101	107
-3	5	11	80	89	-5	11	11	162	146	-2	17	11	179	182	5	0	12	118	110	-5	7	12	131	157

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-4	7	12	141	164	0	13	12	206	190	-1	22	12	200	182	-1	4	13	223	247
-3	7	12	324	340	-5	14	12	61	75	-3	23	12	64	69	0	4	13	131	169
-2	7	12	254	259	-4	14	12	120	143	-2	23	12	132	133	-4	5	13	124	128
-5	8	12	106	106	-3	14	12	95	89	-1	23	12	75	87	-3	5	13	92	97
-4	8	12	172	173	-2	14	12	221	223	0	23	12	103	106	-2	5	13	427	455
-2	8	12	105	133	-1	14	12	205	206	-2	24	12	89	87	-1	5	13	144	132
-1	8	12	305	281	0	14	12	236	207	-1	24	12	158	148	0	5	13	396	371
0	8	12	97	86	-4	15	12	133	147	-3	25	12	105	104	-4	6	13	164	155
-6	9	12	58	73	-3	15	12	207	197	-3	27	12	97	85	-3	6	13	168	172
-5	9	12	164	159	-1	15	12	104	124	-2	27	12	47	35	-2	6	13	139	114
-4	9	12	248	247	-6	16	12	83	80	-1	27	12	48	51	-1	6	13	152	138
-3	9	12	261	241	-4	16	12	172	170	0	27	12	97	98	0	6	13	126	131
-2	9	12	114	108	-3	16	12	132	160	1	0	13	106	144	-5	7	13	85	90
-1	9	12	99	92	-2	16	12	112	103	4	0	13	78	87	-4	7	13	219	224
-6	10	12	106	123	-1	16	12	145	149	5	0	13	49	39	-3	7	13	226	239
-3	10	12	212	219	0	16	12	159	157	-7	1	13	50	48	-2	7	13	104	108
-2	10	12	204	224	-4	17	12	82	77	-6	1	13	102	90	-1	7	13	159	158
-1	10	12	100	109	-2	17	12	285	275	-5	1	13	87	65	0	7	13	355	316
0	10	12	237	223	-1	17	12	141	149	-4	1	13	97	111	-5	8	13	124	124
-7	11	12	106	101	0	17	12	120	113	-3	1	13	213	194	-4	8	13	204	197
-5	11	12	101	101	-5	18	12	129	147	-2	1	13	296	298	-3	8	13	96	109
-4	11	12	213	205	-4	18	12	113	106	0	1	13	54	11	-2	8	13	260	253
-3	11	12	141	155	-3	18	12	103	111	-3	2	13	204	172	-1	8	13	220	180
-1	11	12	217	234	-2	18	12	217	222	-2	2	13	139	158	0	8	13	505	470
0	11	12	120	101	-1	18	12	92	91	-1	2	13	157	190	-6	9	13	63	76
-6	12	12	141	128	-4	19	12	118	113	0	2	13	191	188	-4	9	13	119	100
-5	12	12	56	67	-2	19	12	213	215	-5	3	13	145	146	-3	9	13	110	119
-4	12	12	119	106	0	19	12	332	323	-4	3	13	302	306	-2	9	13	152	151
-3	12	12	124	145	-4	20	12	83	69	-3	3	13	223	211	-1	9	13	111	137
-2	12	12	267	271	-3	20	12	73	97	-2	3	13	141	148	0	9	13	191	190
-1	12	12	206	217	-2	20	12	88	77	-1	3	13	193	188	-6	10	13	86	86
0	12	12	199	199	-1	20	12	155	152	0	3	13	46	47	-4	10	13	271	278
-4	13	12	157	151	-4	21	12	113	106	-5	4	13	229	228	-3	10	13	86	115
-3	13	12	179	184	0	21	12	88	74	-4	4	13	202	200	-2	10	13	184	207
-2	13	12	120	105	-4	22	12	87	108	-3	4	13	151	132	-1	10	13	157	142
-1	13	12	213	221	-2	22	12	101	129	-2	4	13	147	131	-6	11	13	111	125

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	19	13	186	180	-4	3	14	59	61	-4	11	14	215	195	-2	20	14	94	105
-2	20	13	114	130	-2	3	14	98	110	-3	11	14	102	112	-1	20	14	97	97
0	20	13	130	132	-1	3	14	260	223	-2	11	14	337	355	-3	22	14	126	128
-2	21	13	101	104	0	3	14	183	148	0	11	14	240	222	-2	22	14	121	124
-1	21	13	149	165	-5	4	14	96	107	-3	12	14	180	181	-1	22	14	99	95
0	21	13	79	80	-4	4	14	295	296	-1	12	14	137	118	0	23	14	57	38
-2	22	13	71	74	-2	4	14	68	49	0	12	14	124	93	-3	24	14	74	56
-1	22	13	117	124	-1	4	14	276	232	-5	13	14	74	55	-1	24	14	134	134
0	22	13	72	73	-4	5	14	167	179	-4	13	14	129	127	0	24	14	116	112
-4	23	13	82	68	-3	5	14	107	102	-3	13	14	242	233	-3	25	14	88	88
-3	23	13	126	125	-2	5	14	70	104	-2	13	14	163	166	-2	27	14	55	30
-2	23	13	74	80	0	5	14	161	210	-1	13	14	117	126	-2	28	14	35	38
-1	23	13	48	42	-4	6	14	191	195	0	13	14	190	180	-1	28	14	74	64
-2	25	13	103	102	-3	6	14	102	101	-6	14	14	84	76	2	0	15	73	77
0	25	13	147	144	-2	6	14	258	232	-3	14	14	248	253	4	0	15	142	142
-3	26	13	112	103	-6	7	14	147	154	-2	14	14	190	204	-6	1	15	45	66
-1	26	13	43	47	-5	7	14	142	143	-1	14	14	134	136	-5	1	15	83	88
-3	27	13	45	46	-4	7	14	73	86	0	14	14	215	215	-4	1	15	98	92
-3	28	13	92	81	-3	7	14	269	273	-5	15	14	125	117	-3	1	15	109	98
0	0	14	189	188	-2	7	14	233	262	0	15	14	100	87	-2	1	15	270	253
1	0	14	366	334	-1	7	14	203	241	-4	16	14	88	86	-1	1	15	336	319
2	0	14	174	171	0	7	14	280	287	-2	16	14	222	228	0	1	15	92	82
3	0	14	307	295	-6	8	14	29	44	-3	17	14	119	113	-5	2	15	50	59
5	0	14	326	327	-4	8	14	247	243	-2	17	14	191	202	-3	2	15	155	154
-5	1	14	45	69	-3	8	14	217	194	-1	17	14	132	137	-2	2	15	68	77
-4	1	14	183	192	-2	8	14	135	152	0	17	14	252	260	-1	2	15	143	147
-3	1	14	76	94	-1	8	14	189	198	-5	18	14	81	67	-6	3	15	88	81
-2	1	14	189	176	0	8	14	187	196	-4	18	14	186	182	-4	3	15	238	244
-1	1	14	167	152	-6	9	14	66	57	-2	18	14	95	102	-3	3	15	214	202
0	1	14	36	59	-3	9	14	114	105	-1	18	14	152	137	-2	3	15	95	97
-4	2	14	234	216	-2	9	14	139	140	-3	19	14	78	75	-1	3	15	217	245
-3	2	14	202	215	0	9	14	149	189	-2	19	14	68	63	0	3	15	178	131
-2	2	14	298	271	-6	10	14	68	85	-1	19	14	127	121	-5	4	15	97	106
-1	2	14	250	238	-3	10	14	285	277	0	19	14	67	55	-4	4	15	190	182
0	2	14	88	87	-2	10	14	140	144	-5	20	14	45	58	-3	4	15	150	145
-5	3	14	145	159	0	10	14	93	78	-3	20	14	154	144	-2	4	15	101	102

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
0	11	15	84	85	0	21	15	142	138	-5	7	16	124	128	-3	16	16	101	94
-5	12	15	98	101	-3	23	15	113	116	-4	7	16	15	15	-2	16	16	83	79
-3	12	15	81	92	-1	24	15	42	54	-3	7	16	254	270	-3	17	16	67	81
-2	12	15	273	269	-1	27	15	61	63	-2	7	16	102	112	-1	17	16	159	164
-1	12	15	100	129	0	0	16	280	312	-1	7	16	143	153	-4	18	16	74	68
0	12	15	100	74	1	0	16	189	213	0	7	16	111	94	-3	18	16	68	61
-6	13	15	54	74	2	0	16	84	136	-4	8	16	126	128	-2	18	16	69	72
-3	13	15	155	144	5	0	16	143	151	-3	8	16	136	143	-1	18	16	214	221
-2	13	15	121	123	6	0	16	65	86	-2	8	16	182	169	0	18	16	120	98
0	13	15	86	92	-5	1	16	74	73	-1	8	16	48	74	-1	19	16	112	104
-3	14	15	157	150	-2	1	16	90	71	0	8	16	72	79	0	19	16	145	141
-2	14	15	179	171	-1	1	16	78	69	-6	9	16	69	45	-4	20	16	78	76
-1	14	15	119	108	0	1	16	160	157	-2	9	16	88	86	-3	20	16	119	118
0	14	15	350	366	-6	2	16	42	29	-1	9	16	128	124	-2	21	16	114	114
-4	15	15	94	80	-4	2	16	53	72	0	9	16	130	144	-2	24	16	76	66
-3	15	15	109	119	-2	2	16	75	57	-2	10	16	146	148	-1	25	16	63	66
-2	15	15	164	190	-1	2	16	267	276	-1	10	16	91	70	-2	26	16	81	59
-1	15	15	87	93	0	2	16	231	220	-5	11	16	97	78	1	0	17	89	93
0	15	15	68	88	-4	3	16	102	107	-3	11	16	108	120	3	0	17	113	116
-5	16	15	70	70	-3	3	16	117	130	-1	11	16	205	187	-5	1	17	55	67
-4	16	15	74	62	-2	3	16	167	151	0	11	16	210	222	-3	1	17	65	60
-3	16	15	92	83	-1	3	16	132	122	-2	12	16	196	192	-2	1	17	139	125
-1	16	15	136	135	0	3	16	232	257	0	12	16	89	76	-1	1	17	280	232
0	16	15	196	194	-4	4	16	155	151	-4	13	16	151	138	0	1	17	106	48
-5	17	15	76	81	-3	4	16	75	82	-3	13	16	147	152	-1	2	17	113	136
-4	17	15	127	115	-2	4	16	231	235	-2	13	16	139	136	-5	3	17	51	43
-2	17	15	42	60	-1	4	16	242	230	0	13	16	178	176	-4	3	17	152	142
-1	17	15	137	129	0	4	16	87	83	-4	14	16	78	70	-3	3	17	81	82
-1	18	15	129	129	-4	5	16	94	93	-2	14	16	130	101	-2	3	17	120	142
-4	19	15	39	45	-3	5	16	257	254	-5	15	16	99	87	-1	3	17	327	303
-1	19	15	33	34	-2	5	16	147	154	-4	15	16	100	100	-4	4	17	73	78
-3	20	15	72	61	-1	5	16	194	198	-3	15	16	109	103	-2	4	17	136	134
-1	20	15	125	132	0	5	16	150	153	-2	15	16	80	95	-1	4	17	164	147
-4	21	15	88	81	-4	6	16	85	77	-1	15	16	174	180	0	4	17	101	76
-3	21	15	77	67	-2	6	16	181	163	0	15	16	101	87	-4	5	17	77	61
-1	21	15	105	92	-1	6	16	182	193	-4	16	16	68	59	-3	5	17	139	141

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	15	17	143	136	0	3	18	118	94	0	13	18	157	160	-3	5	19	133	135	2	0	20	112	134
-5	16	17	76	72	-6	4	18	79	80	-4	14	18	91	104	-1	5	19	117	124	3	0	20	113	118
-2	16	17	82	84	-3	4	18	218	235	-1	14	18	106	97	0	5	19	166	189	5	0	20	91	114
-1	16	17	116	124	-2	4	18	168	146	-5	15	18	95	96	-5	6	19	63	55	-4	1	20	63	47
0	16	17	61	53	-1	4	18	85	104	-4	15	18	7	23	-3	6	19	77	84	-3	1	20	99	99
-5	17	17	83	97	0	4	18	38	56	-2	15	18	93	99	-2	6	19	112	149	-2	1	20	103	97
-4	17	17	42	49	-3	5	18	159	157	-1	15	18	87	70	-1	6	19	74	92	0	1	20	199	172
-2	17	17	28	29	-2	5	18	205	180	0	16	18	124	115	0	6	19	170	125	-5	2	20	68	44
-1	17	17	144	142	-6	6	18	57	65	-3	17	18	92	75	-5	7	19	84	86	-2	2	20	120	137
-3	18	17	82	76	-2	6	18	121	129	-2	17	18	118	117	-3	7	19	127	131	0	2	20	135	110
-2	18	17	74	83	-1	6	18	231	233	0	17	18	94	79	-2	7	19	91	90	-1	3	20	120	110
0	18	17	116	103	0	6	18	75	109	-3	18	18	103	85	-1	8	19	105	81	0	3	20	114	103
-4	19	17	43	55	-2	7	18	110	109	0	18	18	84	83	0	8	19	120	108	-4	4	20	37	49
-3	19	17	89	74	-1	7	18	264	237	-4	19	18	39	32	-3	9	19	78	70	-3	4	20	89	108
-1	19	17	159	153	0	7	18	63	80	-3	20	18	55	49	-2	9	19	21	52	0	4	20	226	198
0	19	17	31	39	-5	8	18	139	139	-1	21	18	43	64	-1	9	19	128	114	-2	5	20	160	151
-2	20	17	106	103	-3	8	18	72	80	-2	22	18	49	57	-1	10	19	159	184	-1	5	20	77	94
-2	23	17	70	75	-2	8	18	99	95	0	23	18	95	83	0	10	19	99	84	-3	6	20	98	86
-1	23	17	124	132	-1	8	18	81	70	0	24	18	130	107	-3	11	19	67	70	-2	6	20	116	139
-2	24	17	30	15	0	8	18	90	82	1	0	19	68	67	-1	11	19	118	123	0	6	20	118	108
0	0	18	183	155	-4	9	18	85	61	2	0	19	111	126	0	12	19	234	225	-2	7	20	48	76
1	0	18	137	164	-3	9	18	136	146	-3	1	19	184	181	-5	13	19	96	104	-1	7	20	87	80
2	0	18	122	116	-2	9	18	122	109	-2	1	19	235	231	-2	13	19	58	52	-2	8	20	86	79
3	0	18	98	97	-1	9	18	70	64	-1	1	19	134	120	-1	13	19	122	116	-2	9	20	63	76
-4	1	18	72	81	0	9	18	269	279	0	1	19	110	143	-4	14	19	7	18	-3	10	20	57	34
-3	1	18	70	64	-2	10	18	147	134	-3	2	19	136	140	-4	15	19	98	116	-2	10	20	85	80
-2	1	18	153	142	-1	10	18	72	74	-2	2	19	160	152	-3	15	19	12	25	-4	11	20	76	69
-1	1	18	120	114	-4	11	18	46	57	-1	2	19	82	71	0	15	19	84	91	0	11	20	92	109
0	1	18	102	93	-2	11	18	128	127	0	2	19	75	75	-3	16	19	69	63	-3	12	20	83	88
-4	2	18	59	61	-1	11	18	232	229	-4	3	19	71	63	-2	16	19	134	133	-1	12	20	71	60
-2	2	18	237	215	-2	12	18	100	112	-3	3	19	160	160	0	16	19	77	93	0	12	20	93	90
-1	2	18	98	90	-1	12	18	190	211	-2	3	19	276	281	0	17	19	87	86	-1	13	20	87	99
-4	3	18	96	94	0	12	18	208	195	-1	3	19	122	115	-3	18	19	49	29	-1	14	20	74	58
-3	3	18	95	96	-4	13	18	31	58	-3	4	19	162	180	-2	21	19	54	60	0	14	20	148	147
-2	3	18	110	107	-3	13	18	126	114	-1	4	19	63	98	-1	23	19	43	57	-2	15	20	105	103
-1	3	18	169	131	-1	13	18	221	234	0	4	19	134	102	0	0	20	414	355	-2	21	20	51	47

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR $C_{20}H_{26}O_8 \cdot \frac{1}{2}H_2O$

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FU	10FC	H	K	L	10FU	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-3	1	21	95	84	-1	8	21	171	149	-1	1	22	80	85	-4	8	22	34	33	-1	6	23	56	49
-2	1	21	143	127	-1	9	21	123	107	-3	2	22	71	71	-2	8	22	87	87	-1	13	23	51	44
-5	2	21	20	25	0	9	21	188	173	-2	2	22	99	110	-1	8	22	92	88	0	0	24	75	89
-2	2	21	102	88	-2	10	21	76	72	-1	2	22	158	143	0	8	22	163	195	-1	2	24	62	61
0	2	21	93	134	0	10	21	119	97	-4	3	22	81	69	-1	10	22	91	72	0	2	24	40	49
-2	3	21	124	142	-3	12	21	33	46	-1	11	22	77	77	-1	11	22	37	45	-3	3	24	46	51
-1	3	21	119	101	0	12	21	63	72	0	3	22	67	71	0	12	22	109	108	0	4	24	89	109
-2	4	21	46	66	-3	13	21	68	75	-3	4	22	56	37	-2	13	22	45	57	-1	5	24	61	89
-1	4	21	140	111	-2	13	21	108	93	-2	4	22	87	98	-2	15	22	47	61	0	5	24	119	130
-2	5	21	28	50	-1	13	21	80	85	0	4	22	20	28	-2	16	22	52	19	-2	8	24	50	52
-1	5	21	114	104	-2	14	21	44	61	-4	5	22	46	50	-2	18	22	78	77	-2	10	24	37	25
-2	6	21	69	64	0	15	21	124	146	-3	5	22	65	52	-1	19	22	39	56	0	2	25	98	81
0	6	21	270	257	-3	17	21	32	42	-1	5	22	101	100	2	0	23	60	63	0	3	25	74	56
-2	7	21	112	106	-2	20	21	55	69	-2	6	22	59	57	-1	1	23	64	58	0	5	25	63	77
-1	7	21	75	63	-1	20	21	66	67	-1	6	22	87	71	-3	2	23	41	25	-1	6	25	27	34
-4	8	21	70	57	0	0	22	166	169	-1	7	22	45	58	-1	3	23	60	87	-2	8	25	21	41
-3	8	21	36	36	-2	1	22	110	119	0	7	22	93	119	0	3	23	74	94	0	9	25	89	47

Crystal data

Oxidopanamens diacetate, $C_{24}H_{32}O_6$, $M_r=416.5$, orthorhombic,
 $a=12.430(2)$, $b=10.969(2)$, $c=16.320(2)$ Å, $U=2225.2$ Å³,
 $D_m=1.25$, $D_c=1.24$ Mg m⁻³, $Z=4$, $F(000)=896$,
space group $P2_12_12_1$, $\mu(Mo-K\alpha)=0.95$ cm⁻¹.

0,11,L	1,1,L	1,2,L	1,3,L	1,4,L	1,5,L	1,6,L	1,7,L	1,8,L	1,9,L	2,0,L	2,1,L	2,2,L	2,3,L	2,4,L	2,5,L	2,6,L	2,7,L	2,8,L	2,9,L	3,0,L	3,1,L	3,2,L	3,3,L	3,4,L	3,5,L	3,6,L	3,7,L	3,8,L	3,9,L	4,0,L	4,1,L	4,2,L	4,3,L	4,4,L	4,5,L	4,6,L	4,7,L	4,8,L	4,9,L	5,0,L	5,1,L	5,2,L	5,3,L	5,4,L	5,5,L	5,6,L	5,7,L	5,8,L	5,9,L	6,0,L	6,1,L	6,2,L	6,3,L	6,4,L	6,5,L	6,6,L	6,7,L	6,8,L	6,9,L	7,0,L	7,1,L	7,2,L	7,3,L	7,4,L	7,5,L	7,6,L	7,7,L	7,8,L	7,9,L	8,0,L	8,1,L	8,2,L	8,3,L	8,4,L	8,5,L	8,6,L	8,7,L	8,8,L	8,9,L	9,0,L	9,1,L	9,2,L	9,3,L	9,4,L	9,5,L	9,6,L	9,7,L	9,8,L	9,9,L	10,0,L	10,1,L	10,2,L	10,3,L	10,4,L	10,5,L	10,6,L	10,7,L	10,8,L	10,9,L	11,0,L	11,1,L	11,2,L	11,3,L	11,4,L	11,5,L	11,6,L	11,7,L	11,8,L	11,9,L	12,0,L	12,1,L	12,2,L	12,3,L	12,4,L	12,5,L	12,6,L	12,7,L	12,8,L	12,9,L	13,0,L	13,1,L	13,2,L	13,3,L	13,4,L	13,5,L	13,6,L	13,7,L	13,8,L	13,9,L	14,0,L	14,1,L	14,2,L	14,3,L	14,4,L	14,5,L	14,6,L	14,7,L	14,8,L	14,9,L	15,0,L	15,1,L	15,2,L	15,3,L	15,4,L	15,5,L	15,6,L	15,7,L	15,8,L	15,9,L	16,0,L	16,1,L	16,2,L	16,3,L	16,4,L	16,5,L	16,6,L	16,7,L	16,8,L	16,9,L	17,0,L	17,1,L	17,2,L	17,3,L	17,4,L	17,5,L	17,6,L	17,7,L	17,8,L	17,9,L	18,0,L	18,1,L	18,2,L	18,3,L	18,4,L	18,5,L	18,6,L	18,7,L	18,8,L	18,9,L	19,0,L	19,1,L	19,2,L	19,3,L	19,4,L	19,5,L	19,6,L	19,7,L	19,8,L	19,9,L	20,0,L	20,1,L	20,2,L	20,3,L	20,4,L	20,5,L	20,6,L	20,7,L	20,8,L	20,9,L	21,0,L	21,1,L	21,2,L	21,3,L	21,4,L	21,5,L	21,6,L	21,7,L	21,8,L	21,9,L	22,0,L	22,1,L	22,2,L	22,3,L	22,4,L	22,5,L	22,6,L	22,7,L	22,8,L	22,9,L	23,0,L	23,1,L	23,2,L	23,3,L	23,4,L	23,5,L	23,6,L	23,7,L	23,8,L	23,9,L	24,0,L	24,1,L	24,2,L	24,3,L	24,4,L	24,5,L	24,6,L	24,7,L	24,8,L	24,9,L	25,0,L	25,1,L	25,2,L	25,3,L	25,4,L	25,5,L	25,6,L	25,7,L	25,8,L	25,9,L	26,0,L	26,1,L	26,2,L	26,3,L	26,4,L	26,5,L	26,6,L	26,7,L	26,8,L	26,9,L	27,0,L	27,1,L	27,2,L	27,3,L	27,4,L	27,5,L	27,6,L	27,7,L	27,8,L	27,9,L	28,0,L	28,1,L	28,2,L	28,3,L	28,4,L	28,5,L	28,6,L	28,7,L	28,8,L	28,9,L	29,0,L	29,1,L	29,2,L	29,3,L	29,4,L	29,5,L	29,6,L	29,7,L	29,8,L	29,9,L	30,0,L	30,1,L	30,2,L	30,3,L	30,4,L	30,5,L	30,6,L	30,7,L	30,8,L	30,9,L	31,0,L	31,1,L	31,2,L	31,3,L	31,4,L	31,5,L	31,6,L	31,7,L	31,8,L	31,9,L	32,0,L	32,1,L	32,2,L	32,3,L	32,4,L	32,5,L	32,6,L	32,7,L	32,8,L	32,9,L	33,0,L	33,1,L	33,2,L	33,3,L	33,4,L	33,5,L	33,6,L	33,7,L	33,8,L	33,9,L	34,0,L	34,1,L	34,2,L	34,3,L	34,4,L	34,5,L	34,6,L	34,7,L	34,8,L	34,9,L	35,0,L	35,1,L	35,2,L	35,3,L	35,4,L	35,5,L	35,6,L	35,7,L	35,8,L	35,9,L	36,0,L	36,1,L	36,2,L	36,3,L	36,4,L	36,5,L	36,6,L	36,7,L	36,8,L	36,9,L	37,0,L	37,1,L	37,2,L	37,3,L	37,4,L	37,5,L	37,6,L	37,7,L	37,8,L	37,9,L	38,0,L	38,1,L	38,2,L	38,3,L	38,4,L	38,5,L	38,6,L	38,7,L	38,8,L	38,9,L	39,0,L	39,1,L	39,2,L	39,3,L	39,4,L	39,5,L	39,6,L	39,7,L	39,8,L	39,9,L	40,0,L	40,1,L	40,2,L	40,3,L	40,4,L	40,5,L	40,6,L	40,7,L	40,8,L	40,9,L	41,0,L	41,1,L	41,2,L	41,3,L	41,4,L	41,5,L	41,6,L	41,7,L	41,8,L	41,9,L	42,0,L	42,1,L	42,2,L	42,3,L	42,4,L	42,5,L	42,6,L	42,7,L	42,8,L	42,9,L	43,0,L	43,1,L	43,2,L	43,3,L	43,4,L	43,5,L	43,6,L	43,7,L	43,8,L	43,9,L	44,0,L	44,1,L	44,2,L	44,3,L	44,4,L	44,5,L	44,6,L	44,7,L	44,8,L	44,9,L	45,0,L	45,1,L	45,2,L	45,3,L	45,4,L	45,5,L	45,6,L	45,7,L	45,8,L	45,9,L	46,0,L	46,1,L	46,2,L	46,3,L	46,4,L	46,5,L	46,6,L	46,7,L	46,8,L	46,9,L	47,0,L	47,1,L	47,2,L	47,3,L	47,4,L	47,5,L	47,6,L	47,7,L	47,8,L	47,9,L	48,0,L	48,1,L	48,2,L	48,3,L	48,4,L	48,5,L	48,6,L	48,7,L	48,8,L	48,9,L	49,0,L	49,1,L	49,2,L	49,3,L	49,4,L	49,5,L	49,6,L	49,7,L	49,8,L	49,9,L	50,0,L	50,1,L	50,2,L	50,3,L	50,4,L	50,5,L	50,6,L	50,7,L	50,8,L	50,9,L	51,0,L	51,1,L	51,2,L	51,3,L	51,4,L	51,5,L	51,6,L	51,7,L	51,8,L	51,9,L	52,0,L	52,1,L	52,2,L	52,3,L	52,4,L	52,5,L	52,6,L	52,7,L	52,8,L	52,9,L	53,0,L	53,1,L	53,2,L	53,3,L	53,4,L	53,5,L	53,6,L	53,7,L	53,8,L	53,9,L	54,0,L	54,1,L	54,2,L	54,3,L	54,4,L	54,5,L	54,6,L	54,7,L	54,8,L	54,9,L	55,0,L	55,1,L	55,2,L	55,3,L	55,4,L	55,5,L	55,6,L	55,7,L	55,8,L	55,9,L	56,0,L	56,1,L	56,2,L	56,3,L	56,4,L	56,5,L	56,6,L	56,7,L	56,8,L	56,9,L	57,0,L	57,1,L	57,2,L	57,3,L	57,4,L	57,5,L	57,6,L	57,7,L	57,8,L	57,9,L	58,0,L	58,1,L	58,2,L	58,3,L	58,4,L	58,5,L	58,6,L	58,7,L	58,8,L	58,9,L	59,0,L	59,1,L	59,2,L	59,3,L	59,4,L	59,5,L	59,6,L	59,7,L	59,8,L	59,9,L	60,0,L	60,1,L	60,2,L	60,3,L	60,4,L	60,5,L	60,6,L	60,7,L	60,8,L	60,9,L	61,0,L	61,1,L	61,2,L	61,3,L	61,4,L	61,5,L	61,6,L	61,7,L	61,8,L	61,9,L	62,0,L	62,1,L	62,2,L	62,3,L	62,4,L	62,5,L	62,6,L	62,7,L	62,8,L	62,9,L	63,0,L	63,1,L	63,2,L	63,3,L	63,4,L	63,5,L	63,6,L	63,7,L	63,8,L	63,9,L	64,0,L	64,1,L	64,2,L	64,3,L	64,4,L	64,5,L	64,6,L	64,7,L	64,8,L	64,9,L	65,0,L	65,1,L	65,2,L	65,3,L	65,4,L	65,5,L	65,6,L	65,7,L	65,8,L	65,9,L	66,0,L	66,1,L	66,2,L	66,3,L	66,4,L	66,5,L	66,6,L	66,7,L	66,8,L	66,9,L	67,0,L	67,1,L	67,2,L	67,3,L	67,4,L	67,5,L	67,6,L	67,7,L	67,8,L	67,9,L	68,0,L	68,1,L	68,2,L	68,3,L	68,4,L	68,5,L	68,6,L	68,7,L	68,8,L	68,9,L	69,0,L	69,1,L	69,2,L	69,3,L	69,4,L	69,5,L	69,6,L	69,7,L	69,8,L	69,9,L	70,0,L	70,1,L	70,2,L	70,3,L	70,4,L	70,5,L	70,6,L	70,7,L	70,8,L	70,9,L	71,0,L	71,1,L	71,2,L	71,3,L	71,4,L	71,5,L	71,6,L	71,7,L	71,8,L	71,9,L	72,0,L	72,1,L	72,2,L	72,3,L	72,4,L	72,5,L	72,6,L	72,7,L	72,8,L	72,9,L	73,0,L	73,1,L	73,2,L	73,3,L	73,4,L	73,5,L	73,6,L	73,7,L	73,8,L	73,9,L	74,0,L	74,1,L	74,2,L	74,3,L	74,4,L	74,5,L	74,6,L	74,7,L	74,8,L	74,9,L	75,0,L	75,1,L	75,2,L	75,3,L	75,4,L	75,5,L	75,6,L	75,7,L	75,8,L	75,9,L	76,0,L	76,1,L	76,2,L	76,3,L	76,4,L	76,5,L	76,6,L	76,7,L	76,8,L	76,9,L	77,0,L	77,1,L	77,2,L	77,3,L	77,4,L	77,5,L	77,6,L	77,7,L	77,8,L	77,9,L	78,0,L	78,1,L	78,2,L	78,3,L	78,4,L	78,5,L	78,6,L	78,7,L	78,8,L	78,9,L	79,0,L	79,1,L	79,2,L	79,3,L	79,4,L	79,5,L	79,6,L	79,7,L	79,8,L	79,9,L	80,0,L	80,1,L	80,2,L	80,3,L	80,4,L	80,5,L	80,6,L	80,7,L	80,8,L	80,9,L	81,0,L	81,1,L	81,2,L	81,3,L	81,4,L	81,5,L	81,6,L	81,7,L	81,8,L	81,9,L	82,0,L	82,1,L	82,2,L	82,3,L	82,4,L	82,5,L	82,6,L	82,7,L	82,8,L	82,9,L	83,0,L	83,1,L	83,2,L	83,3,L	83,4,L	83,5,L	83,6,L	83,7,L	83,8,L	83,9,L	84,0,L	84,1,L	84,2,L	84,3,L	84,4,L	84,5,L	84,6,L	84,7,L	84,8,L	84,9,L	85,0,L	85,1,L	85,2,L	85,3,L	85,4,L	85,5,L	85,6,L	85,7,L	85,8,L	85,9,L	86,0,L	86,1,L	86,2,L	86,3,L	86,4,L	86,5,L	86,6,L	86,7,L	86,8,L	86,9,L	87,0,L	87,1,L	87,2,L	87,3,L	87,4,L	87,5,L	87,6,L	87,7,L	87,8,L	87,9,L	88,0,L	88,1,L	88,2,L	88,3,L	88,4,L	88,5,L	88,6,L	88,7,L	88,8,L	88,9,L	89,0,L	89,1,L	89,2,L	89,3,L	89,4,L	89,5,L	89,6,L	89,7,L	89,8,L	89,9,L	90,0,L	90,1,L	90,2,L	90,3,L	90,4,L	90,5,L	90,6,L	90,7,L	90,8,L	90,9,L	91,0,L	91,1,L	91,2,L	91,3,L	91,4,L	91,5,L	91,6,L	91,7,L	91,8,L	91,9,L	92,0,L	92,1,L	92,2,L	92,3,L	92,4,L	92,5,L	92,6,L	92,7,L	92,8,L	92,9,L	93,0,L	93,1,L	93,2,L	93,3,L	93,4,L	93,5,L	93,6,L	93,7,L	93,8,L	93,9,L	94,0,L	94,1,L	94,2,L	94,3,L	94,4,L	94,5,L	94,6,L	94,7,L	94,8,L	94,9,L	95,0,L	95,1,L	95,2,L	95,3,L	95,4,L	95,5,L	95,6,L	95,7,L	95,8,L	95,9,L	96,0,L	96,1,L	96,2,L	96,3,L	96,4,L	96,5,L	96,6,L	96,7,L	96,8,L	96,9,L	97,0,L	97,1,L	97,2,L	97,3,L	97,4,L	97,5,L	97,6,L	97,7,L	97,8,L	97,9,L	98,0,L	98,1,L	98,2,L	98,3,L	98,4,L	98,5,L	98,6,L	98,7,L	98,8,L	98,9,L	99,0,L	99,1,L	99,2,L	99,3,L	99,4,L	99,5,L	99,6,L	99,7,L	99,8,L	99,9,L	100,0,L	100,1,L	100,2,L	100,3,L	100,4,L	100,5,L	100,6,L	100,7,L	100,8,L	100,9,L	101,0,L	101,1,L	101,2,L	101,3,L	101,4,L	101,5,L	101,6,L	101,7,L	101,8,L	101,9,L	102,0,L	102,1,L	102,2,L	102,3,L	102,4,L	102,5,L	102,6,L	102,7,L	102,8,L	102,9,L	103,0,L	103,1,L	103,2,L	103,3,L	103,4,L	103,5,L	103,6,L	103,7,L	103,8,L	103,9,L	104,0,L	104,1,L	104,2,L	104,3,L	104,4,L	104,5,L	104,6,L	104,7,L	104,8,L	104,9,L	105,0,L	105,1,L	105,2,L	105,3,L	105,4,L	105,5,L	105,6,L	105,7,L	105,8,L	105,9,L	106,0,L	106,1,L	106,2,L	106,3,L	106,4,L	106,5,L	106,6,L	106,7,L	106,8,L	106,9,L	107,0,L	107,1,L	107,2,L	107,3,L	107,4,L	107,5,L	107,6,L	107,7,L	107,8,L	107,9,L	108,0,L	108,1,L	108,2,L	108,3,L	108,4,L	108,5,L	108,6,L	108,7,L	108,8,L	108,9,L	109,0,L	109,1,L	109,2,L	109,3,L	109,4,L	109,5,L	109,6,L	109,7,L	109,8,L	109,9,L	110,0,L	110,1,L	110,2,L	110,3,L	110,4,L	110,5,L	110,6,L	110,7,L	110,8,L	110,9,L	111,0,L	111,1,L	111,2,L	111,3,L	111,4,L	111,5,L	111,6,L	111,7,L	111,8,L	111,9,L	112,0,L	112,1,L	112,2,L	112,3,L	112,4,L	112,5,L	112,6,L	112,7,L	112,8,L	112,9,L	113,0,L	113,1,L	113,2,L	113,3,L	113,4,L	113,5,L	113,6,L	113,7,L	113,8,L	113,9,L	114,0,L	114,1,L	114,2,L	114,3,L	114,4,L	114,5,L	114,6,L	114,7,L	114,8,L	114,9,L	115,0,L	115,1,L	115,2,L	115,3,L	115,4,L	115,5,L	115,6,L	115,7,L	115,8,L	115,9,L	116,0,L	116,1,L	116,2,L	116,3,L	116,4,L	116,5,L	116,6,L	116,7,L	116,8,L	116,9,L	117,0,L	117,1,L	117,2,L	117,3,L	117,4,L	117,5,L	117,6,L	117,7,L	117,8,L	117,9,L	118,0,L	118,1,L	118,2,L	118,3,L	118,4,L	118,5,L	118,6,L	118,7,L	118,8,L	118,9,L	119,0,L	119,1,L	119,2,L	119,3,L	119,4,L	119,5,L	119,6,L	119,7,L	119,8,L	119,9,L	120,0,L	120,1,L	120,2,L	120,3,L	120,4,L	120,5,L	120,6,L	120,7,L	120,8,L	120,9,L	121,0,L	121,1,L	121,2,L	121,3,L	121,4,L	121,5,L	121,6,L	121,7,L	121,8,L	121,9,L	122,0,L	122,1,L	122,2,L	122,3,L	122,4,L	122,5,L	122,6,L	122,7,L	122,8,L	122,9,L	123,0,L	123,1,L	123,2,L	123,
--------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	------

[illegible]

12	103	102	198	7	61	47	121	7	102	104	195	2,11,L	0	93	87	0	10	132	140	0
13	60	68	320	8	137	147	134	8	109	106	312						11	126	111	90
14	54	67	287	9	100	109	202	9	114	118	267						12	79	75	0
15	89	95	303	10	130	136	199	10	56	61	307						13	108	110	270
17	65	68	69	11	32	32	302	11	60	59	97						14	42	40	180
				12	81	77	184	12	87	84	161						15	196	204	270
				13	132	90	37	13	36	35	162						16	145	142	90
				14	59	50	223	14									17	42	34	180
				15				15	2,9,L								18	90	91	0
																	19	71	81	180

[illegible]

6	52	55	305																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	</
---	----	----	-----	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	----

[illegible]

[illegible]

[illegible]

	7,3,L	19	40	36	318	15	45	37	75	2	45	45	355	4	221	226	180
4	58	61	183			16	50	42	263	3	33	24	203	6	89	82	0
5	80	78	73			17	40	34	151	4	70	56	69	7	47	43	270
6	149	136	244										5	9	59	62	270
7	71	72	316										300	10	176	185	180
8	120	125	163											11	130	131	90
9	113	110	175											12	121	122	180
10	60	64	357											14	39	40	0
11	155	151	211											18	40	45	0
12	60	57	300														
13	81	70	314														
14	58	58	7														
15	84	92	105														
16	68	72	204														
19	40	34	270														
	7,4,L																
0	117	123	90														
1	128	131	95														
2	108	109	280														
3	217	230	80														
4	93	94	302														
5	67	71	311														
7	41	55	116														
8	127	125	17														
9	107	118	101														
10	139	142	272														
11	85	85	250														
12	42	45	165														
13	51	56	335														
14	62	64	283														
17	87	87	226														
18	39	42	339														
	7,5,L																
0	34	39	270														
1	173	184	356														
2	99	97	86														
3	83	90	290														
4	87	92	41														
5	155	160	195														
6	46	50	353														
7	175	189	17														
8	94	108	173														
9	54	49	135														
10	57	60	112														
11	84	80	213														
14	48	45	225														
15	49	50	129														
16	43	41	214														
18	54	66	501														
	7,6,L																
0	110	109	90														
1	156	165	206														
2	265	271	359														
3	130	133	170														
4	66	69	283														
5	64	72	103														
6	49	60	172														
8	59	56	102														
9	196	195	112														
10	90	88	257														
11	41	27	237														
14	36	29	288														
	7,7,L																
0	51	54	270														
1	96	111	342														
2	136	133	159														
3	126	114	347														
4	91	95	87														
5	43	57	289														
6	81	87	281														
8	81	83	216														
10	46	50	119														
11	40	49	155														
13	69	59	141														
14	42	37	171														
	7,8,L																
0	86	65	270														
1	67	67	117														
2	39	54	276														
3	95	96	147														
4	56	70	211														
5	104	106	150														
6	93	97	146														
9	68	71	70														
12	42	39	81														
	7,9,L																
0	38	31	270														
1	37	45	139														
	7,10,L																
0	51	54	270														
1	96	111	342														
2	136	133	159														
3	126	114	347														
4	91	95	87														
5	43	57	289														
6	81	87	281														
8	81	83	216														
10	46	50	119														
11	40	49	155														
13	69	59	141														
14	42	37	171														
	7,11,L																
0	105	101	0														
1	41	31	28														
2	165	172	83														
3	266	266	316														
4	226	234	170														
5	113	106	270														
6	79	64	214														
7	48	42	165														
8	82	90	2														
9	71	75	338														
11	109	114	28														
12	61	64	326														
14	48	45	161														
15	35	39	353														
	7,12,L																
0	49	41	90														
5	49	45	154														
	7,13,L																
0	42	35	90														
	8,0,L																
0	207	200	180														
1	67	47	90														
2	59	69	180														
3	181	182	270														
	8,1,L																
0	105	101	0														
1	41	31	28														
2	165	172	83														
3	266	266	316														
4	226	234	170														
5	113	106	270														
6	79	64	214														
7	48	42	165														
8	82	90	2														
9	71	75	338														
11	109	114	28														
12	61	64	326														

[illegible]

[illegible]

10,5,L	10,9,L	8	86	80	283	11,4,L	11,8,L	5	36	35	134
2	130	129	308	2	43	41	348	9	74	88	84
4	62	62	52	5	46	45	34	10	50	38	80
6	61	68	186	11	56	59	140	11	55	64	
8	37	34	327	13	39	39	86	13	38		
11	55	48	149		61	66	308				
12	50	51	274		40	38	294				
13	54	50	324								
15	40	41	242								
10,6,L	10,10,L	1	136	141	90	11,2,L					
3	36	42	180	2	38	47	312				
5	96	93	311	3	160	168	155				
6	37	36	71	4	147	152	287				
7	38	33	307	5	153	153	300				
13	54	61	87	6	82	75	199				
15	42	38	36	7	73	73	162				
				8	44	40	342				
				9	76	73	211				
				10	85	83	253				
					47	49	36				
10,7,L	11,0,L	11,3,L	11,6,L	11,10,L	11,1,L	11,7,L	11,9,L	11,10,L	11,10,L	11,10,L	11,10,L
4	42	40	326	7	76	80	270	7	76	80	270
5	71	65	324	8	80	77	180	8	80	77	180
7	48	57	250	9	146	149	270	9	146	149	270
13	58	61	307	10	38	39	0	10	38	39	0
14	51	59	92								
15	47	44	236								
10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L	10,8,L
2	59	56	169	0	104	112	90	0	104	112	90
5	67	56	185	1	112	112	184	1	112	112	184
13	43	27	137	2	142	145	242	2	142	145	242
14	46	47	307	3	46	52	100	3	46	52	100
				4	71	67	347	4	71	67	347
				7	73	64	246	7	73	64	246

8	97	95	180	12,0,L	12,3,L	0	72	76	0	37	34	264	11	42	48	270	5	39	42	197
9	62	67	90			1	42	43	195	50	48	122		13,1,L	59	270	2	47	60	210
10	75	78	180			3	69	70	269	63	39	6		13,5,L	73	59	4	44	33	238
	12,1,L					4	38	36	29	41					39	265				
						5	53	53	49	48	55	83		12,7,L	55					
						7	72	71	5	46										
	51	51	180			8	43	44	91	46	56	78								
1	93	94	212			10	55	56	161	46	56	88								
2	125	122	73			11	57	56	98	47	42									
3	44	44	97			14	40	35	29											
	52	57	293																	
4	123	129	133																	
6	43	50	90																	
7	81	88	102																	
8	69	79	195																	
9	43	30	269																	
11																				
	12,2,L																			

	14,1,L	14,4,L	15,0,L	15,4,L	16,3,L
5	38	40	140		
6	50	45	81		
13	53	50	159		
	14,2,L				
0	49	38	0		
2	41	41	214		
7	69	67	203		
	14,3,L				
0	54	52	180		
6	37	32	121		
	14,4,L				
7	46	35	248		
	14,5,L				
2	41	37	180		
4	40	42	187		
	14,6,L				
1	44	41	47		
	14,7,L				
0	45	30	180		
2	64	62	156		
4	41	45	209		
	15,0,L				
0	40	51	0		
2	60	56	60		
6	45	47	48		
	15,1,L				
2	46	49	136		
7	49	35	138		
10	40	27	62		
	15,2,L				
0	80	80	270		
	16,0,L				
0	70	77	180		
	16,1,L				
4	51	53	0		
0	44	34	270		
	16,2,L				
6	38	19	190		
7	44	34	135		
	16,3,L				
0	48	54	0		
1	46	52	317		
2	53	49	311		
3	39	38	292		
8	41	41	298		
	16,4,L				

ACKNOWLEDGMENTS

The work described in this thesis was carried out at the University of Glasgow, in the physical chemistry department, which is under the general supervision of Professor G. A. Sim.

The author is indebted to Professor N. Grassie and Dr. A. Scotney for their supervision, guidance, encouragement and invaluable advice during the course of study, and in the preparation of the thesis.

The author would like to thank Dr. A. Johnston for his helpful advice during the experimental work.

Acknowledgment is due to the macromolecular chemistry group for their helpful discussions, and to various members of the departmental technical staff, in particular Mr G. McCulloch and Mr J. Gorman.

Thanks to Miss N. MacCallum for her neat and diligent typing of the manuscript.

The author is grateful to his family for their encouragement and financial assistance, without which this work would not have been possible.

Last, but not least, I thank my wife Teresa for her patience, understanding and support while the work was in progress.